

Министерство науки и высшего образования РФ
Российская академия наук
Российский фонд фундаментальных исследований
Поволжский государственный технологический университет
Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН
Казанский национальный исследовательский технологический университет
ООО «Резонансные системы»

XXV Всероссийская конференция

СТРУКТУРА И ДИНАМИКА МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ

и 16-я Школа молодых ученых

СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И ДИНАМИКА МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ

СБОРНИК ТЕЗИСОВ ДОКЛАДОВ И СООБЩЕНИЙ
25-29 июня 2018 года, озеро Яльчик

Йошкар-Ола - Москва - Уфа - Казань

УДК 541.183:539.19
ББК 22.36
С 87

Редакционная коллегия:

Грунин Ю.Б.
Грунин Л.Ю.
Масас Д.С.

Структура и динамика молекулярных систем: Сб. тезисов докладов и сообщений на XXV Всерос. конф. – Йошкар-Ола: ПГТУ, 2018. – 168 с.

ISBN 978-5-905314-46-9

Настоящий сборник подготовлен по материалам, представленным участниками XXV Всероссийской конференции «Структура и динамика молекулярных систем» и 16-й Школы молодых ученых «Синтез, структура и динамика молекулярных систем», проводимых с 25 по 29 июня 2018 года в Национальном парке Марий Чодра, озеро Яльчик. Конференция охватывает широкий спектр фундаментальных и прикладных проблем, связанных с изучением структуры и динамики полимерных систем, особенностями молекулярной подвижности в гетерогенных и многокомпонентных системах, современными инструментальными и вычислительными методами исследования структуры и процессов в молекулярных системах. Сборник является рабочим документом конференции, который отражает тематику представленных на ней докладов и сообщений. Издание адресовано специалистам, работающим в области физики и химии молекулярных систем, молекулярной биологии, приборостроения и аналитических методов.

Сборник напечатан с оригиналов, подготовленных авторами

Конференция проводится при финансовой поддержке РФФИ, грант № 18-03-20036
Школа молодых ученых проводится при финансовой поддержке РФФИ, грант № 18-33-10016

ISBN 978-5-905314-46-9

УДК 541.183:539.19
ББК 22.36

Уважаемые коллеги!

Мы рады приветствовать Вас на Юбилейной XXV Всероссийской конференции «Структура и динамика молекулярных систем».

Наша конференция задумывалась как научная платформа для ознакомления российских и зарубежных ученых, аспирантов и студентов с последними достижениями в области физической химии растворов и расплавов высокомолекулярных соединений, полимерных и биополимерных объектов, синтеза, структуры и динамики молекулярных систем, современных физических и физико-химических методов анализа.

Совершенствуясь каждый год и приобщая к этому празднику науки новые поколения амбициозных молодых и будущих ученых, мы продолжаем аккуратно оберегать сформировавшиеся за прошедшие годы традиции конференции, которая стала нетомленной частью научной жизни многих состоявшихся ученых, ежегодно посещающих нас в живописном уголке Центральной России.

Поздравляя Вас с Юбилеем, мы с благодарностью смотрим в прошлое, с надеждой в будущее, и сделаем все, чтобы пребывание на берегу так искренне любимого озера Яльчик в родном Марийском крае для тех участников нынешней конференции, кто долгие годы разделяет с нами это чудесное время жарких научных дискуссий, храня традиции, и тех, кто впервые решил разделить его с нами, поддерживая преемственность, было наполнено яркими докладами, красивыми и содержательными постерами, свежим воздухом, теплой солнечной погодой, культурными и спортивными приключениями, вкусной едой, здоровым сном, музыкой счастья и просто радостными моментами.

Искренне ваш Оргкомитет

ВВЕДЕНИЕ

Организатором XXV Всероссийской конференции «Структура и динамика молекулярных систем» выступает ФГБОУ ВО «Поволжский государственный технологический университет». В роли соорганизаторов выступают ФБГУН «Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН», ФБГУН «Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН», ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет» и ООО «Резонансные системы». Конференция является традиционным ежегодным мероприятием; проводится при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант № 18-03-20036, и входит в перечень мероприятий ОХНМ РАН и ФАНО России.

Востребованность проведения конференции на протяжении 25 лет, как отмечают ее участники, обусловлена актуальностью научных проблем фундаментального и прикладного характера, требующих высококвалифицированного обсуждения на представительных форумах. Цель конференции состоит в координации и интеграции усилий российских и зарубежных ученых, принимающих в ней участие, что необходимо для решения ключевых задач современной науки, техники и производственной технологии.

Это достигается, кроме всего прочего, в рамках успешно функционирующей на базе конференции школы молодых ученых: «Синтез, структура и динамика молекулярных систем», которой в этом году исполняется 16 лет. К участию приглашаются студенты, магистранты, аспиранты и молодые кандидаты наук. Школа позволяет им не только ознакомиться с последними достижениями ведущих исследователей в области физики, физической химии, химии молекул и молекулярных систем на читаемых ими лекциях, но и сделать первые самостоятельные шаги на пути своей научной карьеры, выступая с докладами и вступая в научные дискуссии.

В представленном сборнике размещены тезисы докладов и сообщений, тематика которых включает следующие научные направления:

Структура и динамика полимерных систем. Синтез, структура и динамика дендримеров. Водорастворимые полимеры. Полимерные сетки. Композитные системы. Биополимеры и биосистемы. Электролиты и полиэлектролиты. Нематические жидкости. Критические явления и фазовые равновесия. Процессы самоагрегации. Молекулярная подвижность в гетерогенных и многокомпонентных системах. Наноструктуры и слоистые материалы. Пористые адсорбенты. Коллоидные и дисперсные системы. Мембранные материалы. Сорбционные явления. Современные инструментальные и компьютерные методы исследования молекулярной структуры и процессов в молекулярных системах. Методы молекулярной динамики и квантовой химии.

Доклады участников конференции отражают как современное состояние, так и перспективы развития соответствующих отраслей науки.

УДК 678.743.22

**НАНОМОДИФИКАЦИЯ ПОЛИВИНИЛХЛОРИДА ДИСПЕРСИЯМИ
УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР**Абдрахманова Л.А., Хантимиров А.Г., Низамов Р.К., Хозин В.Г.

*Казанский государственный архитектурно-строительный университет
420043, г. Казань, ул. Зеленая, д. 1
e-mail: laa@kgasu.ru*

При модификации поливинилхлорида (ПВХ) нанодобавками, решая задачи по улучшению свойств материалов, как-то прочностных, теплофизических и других, необходимо еще решать вопросы повышения стабильности ПВХ-композиций и облегчения условий переработки в расплаве. Нанодобавки могут быть введены в рецептуру ПВХ-композиций различными способами, а именно, непосредственно при переработке в расплаве или совместно с различными функциональными компонентами. В данной работе исследуется влияние на закономерности формирования микроструктуры и технологические и эксплуатационные свойства поливинилхлоридных композитов дисперсий углеродных нанотрубок и графеновых пластинок, а также углеродных нанотрубок с функционализированной поверхностью в виде сухих агломерированных порошков. Усредненный тип микрогетерогенной структуры, включающей наличие индивидуальных углеродных структур, так и их агломератов проявляется в весьма противоречивых результатах технологических и эксплуатационных показателей композитов. Представлены данные, отражающие общность и различия влияния наноразмерных добавок на свойства и структуру модифицированных композитов. Установлено, что концентрация углеродных структур в дисперсии, а также природа дисперсионной среды оказывают различное влияние на свойства поливинилхлоридных композиций. Определены наиболее оптимальные концентрации различных по природе углеродных наноструктур в ПВХ-композициях.

Авторы благодарят ООО «НаноТехЦентр» (г. Тамбов) за предоставленные образцы углеродных наноструктур и Междисциплинарный центр КФУ «Аналитическая микроскопия» (г. Казань) за помощь при анализе микроструктуры модифицированных поливинилхлоридных композитов.

УДК 544.15+544.18+547.451.5

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АЦЕТОФЕНОНА И 4-СІ-Рн-МЕТИЛКЕТОНА С АЦЕТИЛЕНОМ¹

Абсалямов Д.З., Орел В.Б.

*Иркутский государственный университет
664003, г. Иркутск, ул. Карла Маркса, д. 1
e-mail: 666damir777@mail.ru*

Известно, что выходы 6,8-диокса-бицикло[3,2,1]октанов (БЦО) в реакциях ацетиленов с ацетофеноном и 4-хлорфенилэтанона существенно различаются (85% и 15%) [1]. В анионной модели с включением молекулы H₂O и с оптимизацией геометрии структур на сечении поверхности потенциальной в рамках модели IEFPCM проведено квантовохимическое (B2PLYP/6-311 + G**//B3LYP/6-31 + G*) исследование реакции С-винилирования этих кетонов (рис. 1).

Оба образующихся β,γ-ненасыщенных кетона, прекурсора БЦО, стабильней реагентов на ~ 19 ккал/моль, кроме того, активационные барьеры их образования близки, что не объясняет разницы выходов БЦО. В системе с 4-хлорфенилэтанонам можно предположить замещение атома хлора в бензольном кольце, свободная

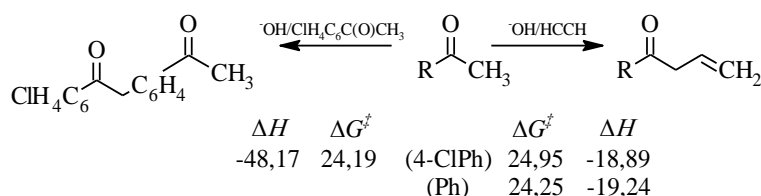


Рис. 1.

энергия активации этой реакции всего на 0.76 ккал/моль ниже, а образующийся продукт на 29.28 ккал/моль устойчивее продуктов винилирования. Малый выход БЦО в реакции с 4-хлорфенилэтанонам может быть связан с возможностью осуществления конкурирующей реакции замещения атома хлора в бензольном кольце.

Литература

1. Trofimov B.A., Schmidt E.Y., Ushakov I.A., et.al. European Journal of Organic Chemistry, 2009. P. 5142.

¹ Работа выполнена на основе экспериментальных исследований ак. Б.А.Трофимова, д.х.н. Е.Ю. Шмидт, под руководством д.х.н., проф. Н.М. Витковской в рамках Госзадания Минобрнауки России, № 4.1671.2017/4.6 и поддержана грантом РФФИ № 18-0300573-а

ОБРАЗОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ ДНК¹

Александров Ю.Д., Лопатина Л.И.

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
119991, г. Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3, химический факультет
e-mail: Aleksandrov-Yura@yandex.ru*

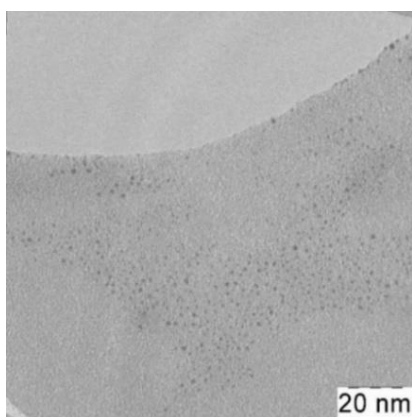


Рис. 1. Наночастицы золота, полученные в водном растворе ДНК при соотношении ДНК: $\text{HAuCl}_4 \leq 1$

ДНК часто используют в качестве стабилизатора при синтезе наночастиц металлов [1,2]. Однако может ли сама ДНК выполнять роль восстановителя? Для ответа на этот вопрос, мы решили изучить, возможно ли образование наночастиц золота в водных растворах ДНК. С этой целью проводили спектрофотометрические и электронномикроскопические исследования водных растворов ДНК и золотохлористоводородной кислоты (HAuCl_4) при различных соотношениях компонентов при pH 7.6.

Нами было найдено, что действительно в водных растворах ДНК происходит восстановление HAuCl_4 при соотношении ДНК: $\text{HAuCl}_4 \leq 1$. Полученные наночастицы имеют размеры 1-2 нм (рис. 1). Восстановление HAuCl_4 , возможно, происходит аминокетонами азотистых оснований макромолекулы ДНК.

Таким образом, ДНК может выполнять не только функцию стабилизатора, но и сама выступать в качестве восстановителя.

Литература

1. Sohn J.S. et al. DNA-templated preparation of gold nanoparticles. *Molecules*, 2011. V. 16. № 10. P. 8143-8151.
2. Storhoff J.J. et al. Sequence-dependent stability of DNA-modified gold nanoparticles. *Langmuir*, 2002. V. 18. № 17. P. 6666-6670.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант 17-08-01087/17

ГАЗОПРОНИЦАЕМОСТЬ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ. ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ, ВОЗМОЖНОСТИ И ОГРАНИЧЕНИЯ

Алентьев А.Ю.

*Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН
119991, г. Москва, Ленинский проспект, д. 29*

Газопроницаемость полимерных материалов является одной из важнейших характеристик, необходимых как для процессов мембранного газоразделения, так и для создания барьерных покрытий.

Физико-химические принципы газопроницаемости полимеров основаны на механизме «растворимость-диффузия», при этом газопроницаемость зависит от свойств газа и структуры полимера. Для мембранных материалов важно соотношение величины газопроницаемости и селективности газоразделения, а для барьерных материалов – только величина газопроницаемости.

На сегодняшний день синтезированы полимеры, как стеклообразные, так и каучуки, различающиеся по величине коэффициента проницаемости кислорода на 10 порядков, многие из которых уже применяются на практике.

В докладе будут рассмотрены основные физико-химические закономерности газопроницаемости, возможности современных материалов и перспективы их использования, методы регулирования газопроницаемости и существующие ограничения, показаны основные представители важнейших классов полимеров и перспективные области их применения.

КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ БИНАРНЫХ СИСТЕМ

Алиев А.Р., Ахмедов И.Р., Какагасанов М.Г., Алиев З.А.

Институт физики им. Х.И. Амирханова ДагНЦ РАН
367003, г. Махачкала, ул. Ярагского, д.94
e-mail: amilraliev@mail.ru

Факторы молекулярной релаксации кристаллов актуальны и в бинарных

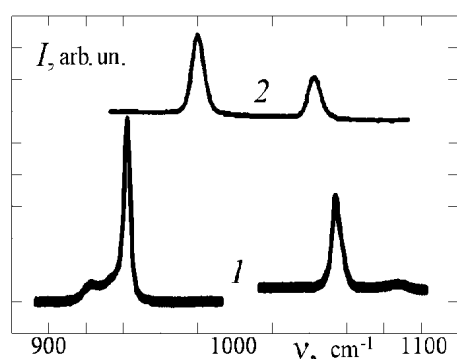


Рис. 1. Спектры КР $\text{KNO}_3\text{-KClO}_4$ (1) и $\text{K}_2\text{CO}_3\text{-K}_2\text{SO}_4$ (2)

системах. В системах с двумя сортами молекул, есть еще один механизм, если молекулы имеют близкие по частотам внутренние колебания (ВК). Тогда релаксация колебания ν_i одной молекулы сопровождается возбуждением колебания ν_j другой, а разница энергий передается решетке. Такой обмен реализуется при $\nu_i > \nu_j$, $\nu_i - \nu_j < \nu_m = k_B \cdot T_D \cdot (h \cdot c)^{-1}$, где ν_m – максимальная частота фононов, см^{-1} ; T_D – температура Дебая, К.

Обычно для кристаллов $T_D > 300$ К и $\nu_m > 208$ см^{-1} . Поэтому можно найти систему, где выполняются условия. На рис. 1 и рис. 2 показаны спектры КР систем $\text{KNO}_3\text{-KClO}_4$ и $\text{K}_2\text{CO}_3\text{-K}_2\text{SO}_4$ в области колебаний ν_1

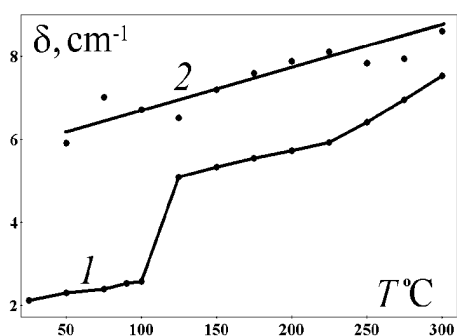


Рис. 2. TZ δ в области $\nu_1(\text{NO}_3^-)$ в KNO_3 (1) и в $\text{KNO}_3\text{-KClO}_4$ (2)

анионов NO_3^- , ClO_4^- , CO_3^{2-} и SO_4^{2-} и температурные зависимости (TZ) ширины δ контуров $\nu_1(\text{A})$ колебаний NO_3^- в кристаллах KNO_3 (1) и в системах $\text{KNO}_3\text{-KClO}_4$ (2). Из рис. 2 видно, что величины δ выше в спектре КР систем. В системах разность $\nu_i - \nu_j$ частот колебаний NO_3^- и ClO_4^- меньше, чем ν_m системы и условие (1) выполнено. Возможна диссипация

энергии ВК NO_3^- с последующим возбуждением ВК ClO_4^- и рождением фонона. Разница в частотах ВК попадает в область высокой плотности состояний фононного спектра.

УДК 539.19

ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ ИЗ БОЛЬШИХ И МАЛЫХ БЕЛКОВ ТЕПЛООВОГО ШОКА В РАСТВОРЕ МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЙЯНИЯ

Амарантов С.В.^а, Чеботарева Н.А.^б, Сапожников А.М.^в

^аФНИЦ «Кристаллография и фотоника»,
Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН
119333, г. Москва, Ленинский проспект, д. 59

^бФИЦ «Фундаментальные основы биотехнологии», Институт биохимии им. А.Н. Баха РАН
119071, г. Москва, Ленинский проспект, д.31, стр. 2

^вИнститут биоорганической химии им. Ак. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН
117997, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 16/10
e-mail: amarantov_s@mail.ru

Известно, что структура белков в растворе может заметно отличаться от структуры белка в кристалле. С целью проверки конформационных изменений белка Hsp70 в растворе были проведены исследования с использованием метода малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР). Предполагалось, что два домена из которых состоит Hsp70-АТФ- и пептид-связывающего, имеют различные пространственные ориентации друг относительно друга в растворе и кристалле. Другими методами, использованными в нашей работе, был метод кругового дихроизма (КД) и аналитического ультрацентрифугирования (АУ). Методом КД был проведен анализ вторичной структуры с определением разупорядоченных областей в полипептидной цепи для исследуемого белка в растворе. Также исследовались методом МУРР комплексы бактериального GroEL и вирусного (фаговый) GP146 шаперонинов, образованные из мономеров «большого белка теплового шока» Hsp60. Еще одним белком с функцией шаперона исследуемым этим методом был белок хрусталика глаза альфа-кристаллин. α -кристаллин – олигомерный полидисперсный белок массой около 700-800 кДа, сформированный из мономеров α A- и α B-кристаллина, играет важнейшую роль в поддержании прозрачности хрусталика глаза. Третичная структура субъединиц α -кристаллина и их расположение в олигомерах α -кристаллина (четвертичная структура) остаются неизвестными.

УДК 621.384.833:544.15

ДИССОЦИАТИВНЫЙ ЗАХВАТ ЭЛЕКТРОНОВ ГУМИНОВЫМИ СОЕДИНЕНИЯМИ¹

Асфандиаров Н.Л., Пшеничнюк С.А., Нафикова Е.П., Рахмеев Р.Г.

*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН
450075, г. Уфа, пр. Октября, д. 71
e-mail: n.asfandiarov@gmail.com*

Гуминовые вещества (ГВ) природного происхождения являются продуктами разложения органики в живой природе и имеют огромное значение для сельского хозяйства, почвоведения, ботаники и агрономии. Методом масс-спектрометрии отрицательных ионов (ОИ) исследованы молекулы 2,5- и 2,6-дигидроксиацетофенона относящиеся к модельным соединениям ГВ. Из данных о временах жизни молекулярных ОИ оценена величина адиабатического сродства к электрону. Анализ каналов распада молекулярных ОИ на стабильные фрагменты, использованием результатов квантово-химических расчетов в приближении ТФП, позволил определить наиболее вероятные структуры осколочных ионов и соответствующих им нейтральных фрагментов. Структуры исследованных молекул приведены на рис. 1-2.

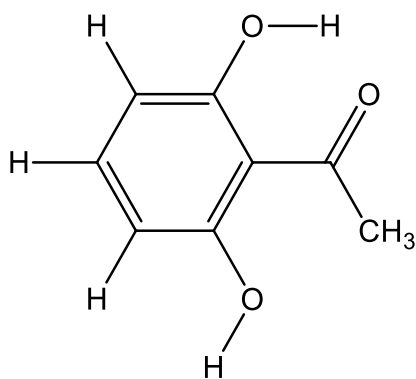


Рис. 1. 2,6-дигидроксиацетофенон

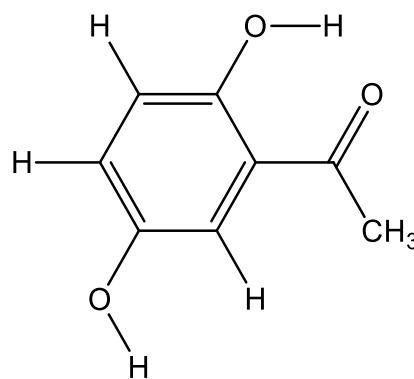


Рис. 2. 2,5-дигидроксиацетофенон

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда, проект № 18-03-00179

ДИЗАЙН МЕМБРАННЫХ ЯКОРЕЙ НА ПЛАТФОРМЕ АМФИФИЛЬНЫХ ТРИГЛИЦЕРИДОВ, СОДЕРЖАЩИХ АММОНИЕВУЮ ГРУППУ И ФРАГМЕНТЫ ГЕРАНИОЛА¹

Ахмедов А.А., Шурпик Д.Н., Стойков И.И.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова,
Казанский (Приволжский) федеральный университет
420008, г. Казань, ул. Кремлевская, д. 18
e-mail: naive2294@gmail.com*

Одной из эффективных стратегий внутриклеточного транспорта лекарственных препаратов является закрепление физиологически активных молекул на поверхности клеточной мембраны с последующим втягиванием их внутрь посредством эндоцитоза. Такое закрепление можно осуществить с помощью мембранного якоря, конструирование которого представляет интерес для создания новых «умных» материалов, способных выступать в качестве агентов адресной доставки лекарственных препаратов, биомиметиков и биосенсоров нового поколения.

Амфифильные соединения сочетают в себе наличие подходящего липофильного остатка и гидрофильного фрагмента, увеличивающей водорастворимость. Это делает их прекрасными кандидатами на роль «мембранных якорей». Интерес представляет изучение способности таких структур к встраиванию в модельные биомембраны, а также установление влияния на такую способность различных полярных групп. Использование природного гераниола, в качестве липофильной компоненты повышает биосовместимость конечных соединений с клеточной мембраной.

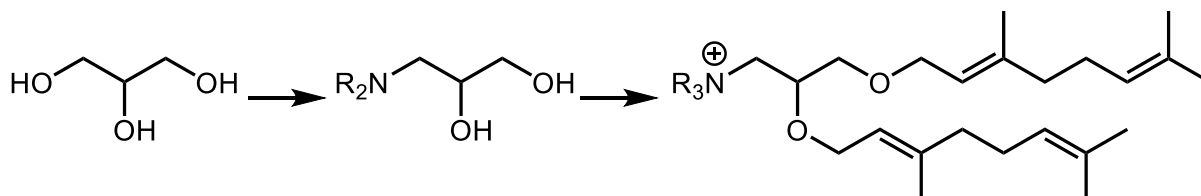


Рис. 1.

Целью исследования является синтез и изучение свойств амфифильных

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 18-03-00315 А

триглицеридов, содержащих фрагменты гераниола и аммониевую группу (рис. 1).

Структура полученных соединений охарактеризована комплексом физических методов – ЯМР ^1H , ^{13}C и ИК спектроскопией, масс-спектрометрией, индивидуальность подтверждена ТСХ, а состав – элементным анализом. Полученные соединения предварительно были изучены на возможность встраивания в модельные фосфолипидные мембраны в воде методом турбидиметрического титрования.

УДК 66.08

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ПОЛИПРОПИЛЕНА В ПРИСУТСТВИИ НУКЛЕАТОРОВ

Балькаев Д.А.^{а,б}, Сурнова А.В.^б, Сухоруков С.А.^а, Амирова Л.М.^а

^а*Казанский национальный исследовательский технический университет –
КАИ им. А.Н. Туполева*

420111, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 10

^б*Казанский (Приволжский) федеральный университет*

420008, г. Казань, ул. Кремлевская, д. 18.

e-mail: dinar.balkaev@yandex.ru

В докладе представлены результаты исследования влияния нуклеирующих добавок на степень кристалличности и физико-механические свойства гомополимера пропилена, охарактеризованы технологические режимы получения наполненных композиций.

В работе использовали: гомополимер пропилена производства НКНХ марка PP1500J. В качестве нуклеирующих агентов использовали зарубежную добавку Hyperform HPN-20E, а также разработанный прототип нового нуклеатора. Введение добавок и грануляцию полимера проводили в двухшнековом экструдере Scientific LTE 16-40.

Для всех образцов методом ДСК (калориметр Netzsch 214 Polyma) были определены все теплофизические характеристики и переходы, и проведен расчет степени кристалличности полимера при различном содержании добавок. Также изучена кристаллическая структура полипропилена в присутствии нуклеирующих добавок методом оптической микроскопии в поляризованном свете.

Проведены физико-механические испытания на растяжение (в соответствии стандарту ASTM D 638), трехточечный изгиб (в соответствии стандарту ASTM D 790), ударную вязкость (в соответствии стандарту ASTM D 256), проведен анализ влияния нуклеирующих добавок на свойства полипропилена.

УДК 539.2

ДИНАМИКА ХОЛЕСТЕРИЧЕСКИХ ПАЛЬЦЕВ И ФОРМИРОВАНИЕ ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУР В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ¹

Басырова Е.Р., Тимиров Ю.И., Скалдин О.А.

*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН
450075, г. Уфа, пр. Октября, д. 71
e-mail: gareeva_e82@mail.ru*

Известно, что и на границе ЖК-изотропная фаза могут образовываться локализованные пространственные структуры, так называемые «холестерические пальцы» (ХП) [1,2], тип которых зависит от граничных условий, материальных параметров, толщины слоя ЖК и внешних воздействий [3].

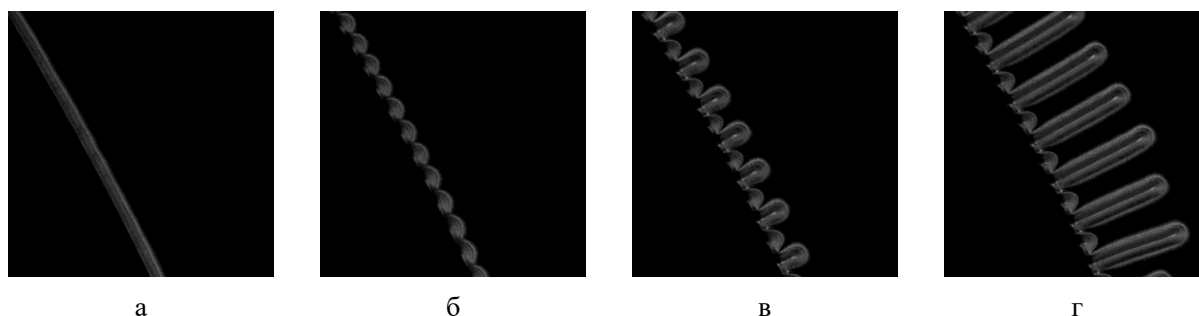


Рис. 1. Формирование холестерических пальцев на границе фаз изотроп-холестерик при температуре 46°C (слева - изотропная фаза, справа - холестерик) во внешнем электрическом поле: а) $U = 7$ В, б) $U = 10$ В, в) $U = 11$ В, г) $U = 11.5$ В. Поляризаторы скрещены

В данной работе экспериментально изучены процессы зарождения и дальнейшего роста структур типа ХП (рис. 1). Параметром управления роста ХП является переменное электрическое поле. Как видно из рисунка, с увеличением напряжения ХП начинают расти перпендикулярно границе раздела фаз. При этом линейный рост ХП сопровождается формированием периодической структуры. Причины формирования и возможные механизмы наблюдаемых эффектов обсуждаются.

Литература

1. Baundry J., Pirkel S., Oswald P. *Physical Review E*, 1998. V. 57. P. 3038-3049.
2. Gil L., Gilli J.M. *Physical Review Letters*, 1998. V. 80. P. 5742-5745.
3. Oswald, P. *Liquid Crystals*, 2009. V. 36. P. 967-975.

¹ Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, грант № 18-32-00805. В экспериментальных исследованиях использовалось оборудование ЦКП «Спектр» ИФМК УФИЦ РАН и РЦКП «Агидель»

ДАТЧИК «КОЛЕНО» ДЛЯ СПЕЦИАЛИЗИРОВАННОГО МАГНИТНО-РЕЗОНАНСНОГО ТОМОГРАФА

Баязитов А.А., Фаттахов Я.В., Фахрутдинов А.Р., Шагалов В.А., Аникин А.Н.,
Хабипов Р.Ш., Крылатых Н.А.

*Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН
420029, г. Казань, Сибирский тракт, д. 10/7
e-mail: bayazitov.alfis@kfti.knc.ru*

Данная работа посвящена разработке датчика для малогабаритного травматологического томографа с полем порядка 0.4 Тл. Рабочая частота томографа $F_p = 17.51$ МГц. Датчик состоит из передающего и приемного контуров. Так как зазор магнита всего 210 мм, то передающий и приемный контуры располагаются на близком расстоянии друг от друга. Вследствие этого возникает связь между контурами даже при условии, что главные оси контуров ортогональны. В работе описан способ уменьшения связи между передающим и приемным контуром и представлены результаты измерения. Для увеличения соотношения сигнал/шум целесообразно увеличивать коэффициент заполнения датчика уменьшая его размер до требуемой величины, определяемой анатомическими особенностями изучаемых частей тела. При изменении размеров датчика требуется перестройка расположения его витков для сохранения однородности поля принимаемого сигнала. В работе приведены результаты измерения распределения поля приемного датчика и настройки его однородности. Так же приводятся результаты расчета и экспериментальные данные согласования передающего контура с подводным кабелем от передатчика.

УДК 66.071.6.081.6, 66.069.85

ПРОНИЦАЕМОСТЬ И ДИФФУЗИЯ ГАЗОВ ДЛЯ НОВЫХ ФТОРСОДЕРЖАЩИХ ПОЛИЭФИРИМИДОВ

Белов Н.А.^а, Никифоров Р.Ю.^а, Banerjee S.^б, Рыжих В.Е.^а, Ямпольский Ю.П.^а

^а*Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН
119991, г. Москва, Ленинский проспект, д. 29*

^б*Indian Institute of Technology, India
e-mail: belov@ips.ac.ru*

Полиэфиримиды (ПЭИ) являются перспективными мембранными материалами для целей газоразделения благодаря их термической, механической стабильности и привлекательным газоразделительным характеристикам [1]. Эти свойства, однако, можно улучшить путем химической модификации исходных сомономеров (диамин и диангидрид) через введение в их структуру боковых групп Me₃C-, F₃C-.

В данной работе исследованию подверглись ПЭИ на основе новых диаминов с указанными фрагментами и стандартными дигангидами (6FDA, BPADA, ODPA, BTDA).

Полученные ПЭИ – аморфные стеклообразные полимеры с хорошими механическими свойствами. Прочность на разрыв и модуль Юнга полимеров изменялся в интервале 70-95 МПа и 1.6-1.9 ГПа соответственно, а температуры стеклования – от 215 до 254°C. Предсказанные по методу аддитивных групповых вкладов значения коэффициентов проницаемости различаются менее чем в 3 раза, что можно считать удовлетворительным соответствием. Из рассмотрения полученных газотранспортных параметров исследованных ПЭИ следует, что они представляют интерес для разделения смеси O₂-N₂, в то время как по другим парам газов эти ПЭИ располагаются на диаграммах Робсона в общем облаке точек.

Литература

1. Ohya N., Kudryavtsev V.V., Semenova S.I. Polyimide membranes: applications, abrications and properties. CRC Press, 1997.

УДК 541.64:547.78

ТЕРМОДИНАМИКА ДЕФОРМАЦИИ НИЗКО КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПОЛИОЛЕФИНОВ¹

Бессонова Н.П.^а, Крашенинников С.В.^а, Щербина М.А.^б

*^аНаучно-исследовательского физико-химического института им. Л.Я. Карпова
105064, г. Москва, ул. Воронцово поле, д. 10*

*^бИнститут синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН
117393, г. Москва, ул. Профсоюзная, д. 70
e-mail: besson@cc.nifhi.ac.ru*

Достижения в области синтеза олефиновых полимеров (ОП) позволяют получать хорошо регулируемые композиционно однородные системы, что дало возможность расширить спектр ОП в низко кристаллическую область. Метод деформационной калориметрии, основанный на одновременной прецизионной регистрации механических и тепловых эффектов, позволяет не только оценить свободную энергию деформации, ее внутри- и межмолекулярные составляющие, определить температурный коэффициент невозмущенных размеров молекул, но и выявить вклад отдельных компонентов в деформационные свойства гетерогенной системы. На основании результатов, полученных методом деформационной калориметрии, проведено исследование механизма одноосной деформации низко кристаллических сополимеров этилена с октенем, характеризующихся каучукоподобным поведением и высокими деформационно-прочностными свойствами. Установлено, что в исследуемых полиолефинах на начальном этапе деформации происходит разрушение исходной сетки кристаллитов, а область больших деформаций контролируется изменениями, происходящими в аморфных областях (внутрицепными конформационными переходами). Обнаружено, что энергетическая составляющая – доля внутримолекулярных энергетических изменений резко возрастает с понижением плотности, свидетельствуя о повышении конформационного барьера с увеличением октеновых разветвлений.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 17-03-00722

УДК 544.15+544.18+547.451.5

КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ АЛЬДОЛЬНОЙ КОНДЕНСАЦИИ КЕТОНОВ В СУПЕРОСНОВНОЙ СРЕДЕ¹

Бобков А.С.

Иркутский государственный университет
664003, Иркутск, ул. Карла Маркса, д. 1
e-mail: alex.bobkov@isu.ru

Методом CBS-Q//B3 с учетом энергии сольватации в DMSO в рамках модели IEF PCM исследована реакция альдольной конденсации ацетона и ацетофенона. Взаимная ориентация двух карбонильных групп в переходном состоянии характеризуется двугранным углом $\angle\text{OCCO}$, определяющим конформацию образующегося альдоля.

Нуклеофильное присоединение $\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{CH}_2^-$ по карбонильной группе приводит к образованию только AC-аниона альдоля. В случае $\text{R} = \text{Ph}$ активационный барьер образования термодинамически менее стабильного SC-конформера на 2.2 ккал/моль выше, чем для AC-.

Присутствие молекулы воды, сольватирующей карбанионный центр, увеличивает барьеры и стабилизирует SC-конформеры анионов альдолей.

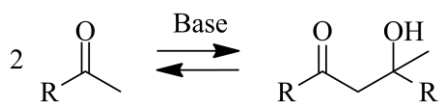


Рис. 1. Схема образования альдоля (R = Me, Ph)

Реакция конденсации с ее невысокими активационными барьерами могла бы конкурировать с реакцией нуклеофильного присоединением кетонов к ацетиленам в суперосновной среде ($\Delta G^\ddagger \approx 21\text{-}24$ ккал/моль), но малая стабильность образующихся альдолей способствует их распаду при нагревании в условиях эксперимента и определяет их отсутствие в составе продуктов.

Табл. 1. Энтальпии ΔH и активационные барьеры ΔG^\ddagger образования альдолей, ккал/моль

	R = CH ₃			R = Ph			
	0	1	1	0	0	1	1
$\angle\text{OCCO}$	AC (132.2°)	SC (70.3°)	AC (126.0°)	SC (8.8°)	AC (144.3°)	SC (21.6°)	AC (148.1°)
ΔH	0.0	-6.9	0.0	1.3	-1.3	-5.8	0.1
ΔG^\ddagger	9.9	10.9	14.0	9.4	11.6	10.4	13.0

¹ Работа выполнена под руководством д.х.н., проф. Н.М. Витковского, в рамках Госзадания Минобрнауки России, № 4.1671.2017/4.6, и поддержана грантом РФФИ, № 18-0300573-а

МІМ ТЕХНОЛОГИЯ: МЕТОДЫ УДАЛЕНИЯ СВЯЗУЮЩИХ ИЗ ТВЕРДЫХ МЕТАЛЛ-ПОЛИМЕРНЫХ ДИСПЕРСИЙ

Богданова Ю.Г.

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
119991, г. Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3, химический факультет
e-mail: yulibogd@yandex.ru*

Metall Injection Molding, или МІМ-технология, является современным методом производства металлических деталей путем их инжекционного формования из металл-полимерных дисперсий. Несмотря на то, что пионерские работы в этой области появились в 1960-70 гг., интенсивное развитие МІМ-технология получила с 2007 года. В России она и по сей день используется не так широко, как в зарубежных странах [1]. Технологический процесс МІМ включает несколько базовых стадий: создание пасты на основе частиц металлов или их оксидов и полимерного связующего, формование твердой детали, из которой затем удаляют связующее с последующим спеканием каркаса из металлических частиц. МІМ-технология позволяет получать детали сложной формы с существенно меньшей дефектностью структуры, более высокой размерной точностью и за более короткое время производственного цикла, чем альтернативные технологии.

Стадия дебиндинга – удаления полимерного связующего из сформованной детали – является наиболее проблематичной и длительной из всех стадий МІМ. Поэтому акцент в докладе сделан на методы дебиндинга связующих различной химической природы. С целью всесторонней оценки актуальных направлений исследований в области МІМ представлены базовые рецептуры композиций, применяющихся на сегодняшний день для инжекционного формования.

Литература

1. Каблов Е.Н., Евгенов А.Г., Оспенникова О.Г. и др. Известия ВУЗов. Машиностроение, 2016. Т. 678. № 9. С. 62-80.

УДК 544.015.5

РАСТВОРИМОСТЬ, ВЗАИМОДИФФУЗИЯ И ОТВЕРЖДЕНИЕ В СИСТЕМЕ ЭПОКСИДНЫЙ «ОЛИГОМЕР- ДИАМИНОДИФЕНИЛСУЛЬФОН»¹Будылин Н.Ю., Шапагин А.В., Хасбиуллин Р.Р., Чалых А.Е.*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4*

В производстве композиционных материалов на основе термореактивных связующих большое значение имеет правильный выбор температурно-временного режима гомогенизации смеси эпоксидный олигомер (ЭО) – отвердитель и технологических параметров отверждения композиции. Естественно, возникает интерес определить при каких именно условиях происходит процесс растворения частиц отвердителя в расплаве олигомера и какие константы описывают этот процесс.

В данной работе впервые проведено комплексное исследование кинетики растворения диаминодифенилсульфона (ДДС) в эпоксидном олигомере. Исследование взаимодиффузии и фазовых равновесий в процессе отверждения градиентных растворов проводили методами оптической интерферометрии и ДСК в диапазоне температур от 22 до 250°C. Определена критическая температура реакции отверждения ($T_{кр}$). Установлено, что фазовые равновесия в системе ЭО-ДДС при $T < T_{кр}$ характеризуются ДФС с кристаллическим равновесием. Определен температурный диапазон диффузионной стадии растворения при $T < T_{кр}$ и изменение фазовой структуры диффузионной зоны при $T > T_{кр}$. Определены коэффициенты диффузии, рассчитаны кажущиеся энергии активации диффузии. Показано, что при температуре $T < T_{кр}$ возможно приготовление истинных растворов ЭО-ДДС.

¹ Работа выполнена в рамках Госзадания, регистрационный номер АААА-А18-118030690046-0

УДК 541.64:539.2

СИНТЕЗ РАСТВОРИМОГО ПОЛИНАФТОИЛЕНБЕНЗИМИДАЗОЛА НА ОСНОВЕ 2,2-БИС[4-(3,4-ДИАМИНОФЕНОКСИ)ФЕНИЛ]ГЕКСАФТОРПРОПАНА И ДИАНГИДРИДА 1,3-БИС-(1,8-ДИКАРБОКСИ-НАФТОИЛ-4)БЕНЗОЛА¹

Бузин М.И., Булычева Е.Г., Беломоина Н.М., Никифорова Г.Г., Васильев В.Г.

*Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН
119991, г. Москва, ул. Вавилова, д. 28
e-mail: buzin@ineos.ac.ru*

Полинафтоиленбензимидазолы (ПНБИ) обладают ценными эксплуатационными характеристиками (высокой термо-, хемо-, радиационной стойкостью, и др.), однако отличаются чрезвычайно низкой растворимостью в органических растворителях, растворяясь, обычно, исключительно в серной кислоте. Нами осуществлен синтез ПНБИ, на основе 2,2-бис[4-(3,4-диаминофеноксифенил)гексафторпропана и диангидрида 1,3-бис-(1,8-дикарбоксинафтоил-4)бензола высокотемпературной каталитической полигетероциклизацией в феноле с использованием каталитической смеси: бензойная кислота-бензимидазол при 150-180°C. Полимер растворим в смеси тетрахлорэтан:фенол и обладает пленкообразующей способностью. В ИК-спектре полученного полимера наблюдаются максимумы поглощения в интервале 1550-1560 см⁻¹, характерные для поглощения 1,8-нафтоилен-1,2-бензимидазола, 162, 1590 и 1450 см⁻¹, приписываемые бензимидазольному циклу, ф также в области 1695 см⁻¹, приписываемые карбонильной группе 1,8-нафтоилен-1,2-бензимидазола. Согласно данным ТГА температура начала разложения синтезированного ПНБИ выше 500°C. Сульфирование ПНБИ смесью олеума и серной кислоты приводит к появлению растворимости его сульфопроизводных в N-МП. Наличие атомов фтора может представлять интерес для получения материалов с низкой диэлектрической проницаемостью [1].

Литература

1. Ni H.J., Liu J.G., Yang S.Y. Chemistry Letters, 2016. 45. P. 75.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 16-03-00624

УДК 541.64

МОДИФИЦИРОВАНИЕ ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТА ЛИНЕЙНЫМИ СОПОЛИМЕРАМИ Н-БУТИЛАКРИЛАТА И СТИРОЛА С РАЗНОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ МАССОЙ¹

Ваганов Е.В., Перепелицина Е.О., Бубнова М.Л., Образцова Н.А., Курочкин С.А.

*Институт проблем химической физики РАН
142432, г. Черноголовка, пр. Ак. Семенова, д. 1
e-mail: vaganov@icp.ac.ru*

В качестве перспективной добавки, увеличивающей физико-механические свойства полиметилметакрилатных стекол, рассматривается линейный сополимер на основе н-бутилакрилата и стирола.

В настоящей работе впервые синтезированы сополимеры н-бутилакрилата и стирола (95:5 мас.%) в растворе толуола (50 мас.% мономера) с разной молекулярной массой, инициированной 2,2'-азо-бис-изобутиронитрилом, в режиме «живой» радикальной полимеризации в присутствии агента обратимой передачи цепи дибензилтретиокарбоната. Исследована кинетика «живой» радикальной сополимеризации н-бутилакрилата и стирола, определены молекулярно-массовые характеристики сополимеров, их показатели преломления, изучены ИК-спектры сополимеров.

Полученные и исследованные сополимеры использовали в качестве модификаторов полиметилметакрилата. Методом радикальной полимеризации в массе метилметакрилата, инициируемой 2,2'-азо-бис-изобутиронитрилом, синтезированы образцы полиметилметакрилатного стекла с 5 и 10%-ой добавкой сополимеров с разной молекулярной массой. Изучены кинетические закономерности радикальной полимеризации метилметакрилата в присутствии сополимеров, определены модуль упругости, предельное напряжение разрушения, работа разрушения, температуры стеклования, светопропускаемость модифицированных полиметилметакрилатов.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Программы Президиума РАН «Наноструктуры»

УДК 538.22

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ГРАФЕНА В ПРИБЛИЖЕНИИ СТАТИЧЕСКИХ ФЛУКТУАЦИЙ В РАМКАХ МОДЕЛИ ХАББАРДА

Ванчугов А.А.

*Марийский государственный университет
424000, г. Йошкар-Ола, пл. Ленина, д. 1
e-mail: alvanch@mail.ru*

В работе изучается один из самых перспективных в мире материалов – графен. Исследование необходимо было начать с представления гамильтониана в рамках классической модели Хаббарда:

$$\hat{H} = \varepsilon \sum_{f,\sigma} a_{f\sigma}^+ a_{f\sigma} + \sum_{f \neq f'} V_{f,f'} (a_{f\sigma}^+ a_{f'\sigma} + a_{f'\sigma}^+ a_{f\sigma}) + U \sum_{f,\sigma} \hat{n}_{f\uparrow} \hat{n}_{f\downarrow}, \quad (1)$$

где ε – собственная энергия электронов, $V_{f,f'}$ – интеграл перескока электрона с узла f на соседний узел f' нанокластера графена, U – кулоновский потенциал, $a_{f\sigma}^+$, $a_{f\sigma}$ – операторы рождения и уничтожения электрона на узле f с проекцией спина σ .

В данной работе были рассмотрены различные по размеру нанокластеры графена. Начиная от первой системы – простого гексагона, путем увеличения размера количество атомов увеличилось с 6 до 384.

Так же в работе представлены энергетические спектры нанокластеров в приближении статических флуктуаций в рамках модели Хаббарда. Рассчитаны и представлены уравнения на химический потенциал, который показывает зависимость количества электронов от количества атомов углерода в системе.

Для рассмотренных нанокластеров графена была рассчитана энергия основного состояния. Было проанализировано изменение вида энергии основного состояния при увеличении количества атомов в структуре.

Рассчитаны и представлены графики плотностей электронных состояний для различных по размеру нанокластеров графена, включая бесконечную по размеру структуру.

УДК 544.18; 544.163.2, 544.147.4

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕВАЛЕНТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ПРИ ДИЗАЙНЕ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ С КВАДРАТИЧНОЙ НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТЬЮ¹

Васильев И.В., Шарипова А.В., Фоминых О.Д., Балакина М.Ю.

Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН
420088, г. Казань, ул. Ак. Арбузова, д. 8
e-mail: vasilyev.ilya.1206@gmail.com

Молекулярными источниками нелинейно-оптического (НЛО) отклика полимерного материала являются органические хромофоры, ориентированные в приложенном электрическом поле. Невалентные взаимодействия между хромофорами (рис. 1а,б), а также между хромофорами и полимерной матрицей (рис. 1в) могут способствовать релаксационной стабильности ориентационного порядка

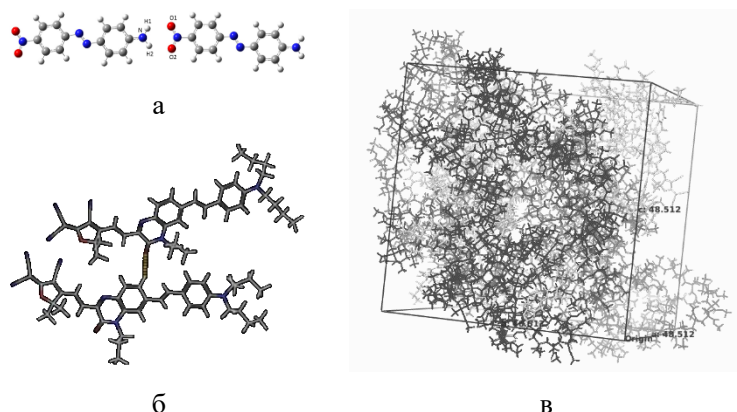


Рис. 1. Исследованные невалентные взаимодействия

хромофоров и связанного с ним НЛО отклика. Влияние невалентных взаимодействий на НЛО характеристики кластеров хромофоров (с азо- и хиноксалиновыми группами в составе π -электронного мостика) и модельных полимерных систем на основе ПММА исследовано методами квантовой химии и атомистического моделирования. Первая гиперполяризуемость хромофоров и димеров, β , рассчитана методами DFT (функционалы M06-2X, ω B97X-D) и MP2. Показано, что образование J-димеров хромофоров приводит к существенному увеличению β в ~ 3 раза. Атомистическое моделирование позволило установить наличие различных невалентных взаимодействий: обычных и ароматических Н-связей и π - π связей как между хромофорами, так и между хромофорами и матрицей.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Программы Президиума РАН № 32

УДК 665.6/7

МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА SARA-ФРАКЦИЙ ТЯЖЕЛОЙ НЕФТИ ПО ДАННЫМ ЯМР РЕЛАКСАЦИИ В НИЗКИХ ПОЛЯХ

Волков В.Я.^а, Сахаров Б.В.^б, Хасанова Н.М.^в

^аМосковский технологический университет

119571, г. Москва, пр. Вернадского, д. 86

^бГосударственный научный центр прикладной микробиологии и биотехнологии

142279, Московская область, пос. Оболенск, ФБУН ГНЦ ПМБ

^вКазанский (Приволжский) федеральный университет

420008, г. Казань, ул. Кремлевская, д. 18

e-mail: volkovobolensk@mail.ru

Под влиянием парамагнитных центров, входящих в состав асфальтенов, амплитудно-релаксационные характеристики протонов в образцах тяжелых нефтей делятся на 6 групп, связанных с твердыми асфальтенами (в кристаллическом и аморфном состояниях), смолами (спирто-бензолными и бензолными), ароматическими и насыщенными соединениями. Амплитуды сигналов ЯМР характеризуют содержание этих фракций в образце, а времена релаксации определяются подвижностью молекул и динамикой их обмена между фракциями. Отнесение этих амплитуд к полной величине сигнала в нулевой момент времени сразу по окончании 90°-го импульса позволяет построить SARA-гистограмму истинного состава анализируемой нефти без искажений, связанных с предварительным выделением асфальтенов и последующим хроматографическим разделением асфальтенов на фракции. Это позволяет получать детальную информацию об особенностях взаимодействия компонентов сырой, и более того, «живой» нефти, которая безвозвратно утрачивается при стандартном SARA методе анализа. Авторами впервые методом ЯМР релаксации *in situ* было получено прямое подтверждение предположения, что увеличение количества асфальтенов при охлаждении сырой нефти происходит за счет встраивания молекул смол в структуру асфальтеновых агрегатов. Обсуждаются возможные механизмы и способы контроля агрегации асфальтенов.

УДК 541.18

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ИСПАРЕНИЯ НА СТРУКТУРУ И ПРОВОДИМОСТЬ ТОНКИХ ПЛЕНОК, СФОРМИРОВАННЫХ МЕТОДОМ ПОДВИЖНОГО МЕНИСКА ИЗ НАНОДИСПЕРСИЙ ЧАСТИЦ СЕРЕБРАВысоцкий В.В., Ролдугин В.И., Урюпина О.Я., Сенчихин И.Н., Зайцева А.В.

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4
e-mail: dr.vysotzkij@yandex.ru*

Исследовано влияние температуры (23-58°C) на структуру и проводимость тонких пленок, формирующихся методом подвижного мениска из нанодисперсий частиц серебра размером 6.5 и 70 нм. Показано, что повышение температуры приводит к экспоненциальному падению удельной проводимости, при этом толщина пленки изменяется немонотонно. В случае «крупных» частиц повышение температуры приводит к ухудшению эффективности их осаждения на подложку.

Полученные в данной работе результаты показывают, что структура и электропроводность тонких пленок, формирующихся методом подвижного мениска из нанодисперсий частиц серебра, существенно зависят от температуры испарения. В случае основного эксперимента толщина пленки изменяется немонотонно, а удельная проводимость экспоненциально уменьшается. В дополнительном эксперименте, в отсутствие в нанодисперсии растворенных веществ, эффективность осаждения наночастиц на подложку существенно уменьшается при росте температуры. Нетривиальность полученных результатов указывает на многообразие процессов, происходящих при образовании пленки из нанодисперсий при наличии в них растворимых компонентов и сложный механизм формирования ее структуры и проводимости.

УДК 539.143.4

ФОРМИРОВАНИЕ ГЭП НА ЯДРАХ La В СИСТЕМЕ La₂CuO₄

Галимуллина С.И., Сафонова О.А., Шарипова А.Р., Шайдуллин Ф.Р.,
Ахметзянова Г.И., Погорельцев А.И., Матухин В.Л.

*Казанский государственный энергетический университет
420066, г. Казань, ул. Красносельская, д. 51
e-mail: apogoreltsev@rambler.ru*

Ранее нами было проведено экспериментальное исследование магнитного фазового перехода в купрате лантана La₂CuO₄ с использованием импульсного метода ядерного квадрупольного резонанса на ядрах ¹³⁹La (спин ядра I = 7/2). Исследовалась температурная зависимость резонансных частот для перехода 5/2-3/2. Было установлено, что температура Нееля изучаемого образца составляла T_N ~ 250К. В настоящей работе полученные частоты были использованы для исследования особенностей формирования градиента электрического поля (ГЭП) на ядрах лантана, а также для изучения распределения электронной плотности (ЭП) в области квадрупольного ядра La в немагнитной фазе (T ~ 270К). Использовался кластерный подход – исследовался кластер La₁₀Cu₅O₂₅ⁿ. Оценки ГЭП на ядрах лантана первоначально были выполнены в рамках самосогласованного ограниченного метода Хартри-Фока с открытыми оболочками (SCF-LCAO-ROHF) с использованием базиса MIDI, затем использовался DFT режим. Резонансные частоты определялись с использованием численного решения соответствующего секулярного уравнения для спина I = 7/2. Ближайшая к фазовому переходу измеренная «немагнитная» резонансная частота составляла ν_Q ~ 12.36МГц.

При проведении предварительных исследований влияния недостатка кислорода на градиент электрического поля (ГЭП) в области ядра La, выяснилось, что отсутствие «парного» кислорода (например, O₃₀ в паре с La₈) резко, практически на порядок, понижает ГЭП (ν_Q ~ 1.2МГц) на лантане. Поэтому можно предположить, что ГЭП на лантане формируется в первую очередь связью La с ближайшим атомом кислорода. В целом связи La-O можно отнести к промежуточному типу.

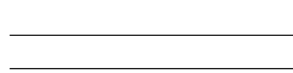
УДК 539.143.4

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ДИАГРАММЫ В ДЕЛАФОССИТЕ CuAlO_2

Галимуллина С.И., Шарипова А.Р., Сафонова О.А., Ашихмин А.А.,
Погорельцев А.И., Матухин В.Л., Шмидт Е.В.

*Казанский государственный энергетический университет
420066, г. Казань, ул. Красносельская, д. 51
e-mail: apogoreltsev@rambler.ru, alrusha@yandex.ru*

Из проведенных нами ранее экспериментов с использованием импульсного метода ядерного квадрупольного резонанса на ядрах $^{63,65}\text{Cu}$ в полупроводниковом соединении CuAlO_2 (кристаллическая структура делафоссита) были определены



значения квадрупольной частоты ν_Q (28.12 МГц) и параметра асимметрии η ($\eta \sim 0$). Полученные в эксперименте квадрупольные параметры были использованы для исследования особенностей распределения электронной плотности (ЭП) в делафоссите CuAlO_2 в области ядра меди. На рис. 1 приведена диаграмма энергетических уровней для кластера $\text{Cu}_7\text{Al}_6\text{O}_{14}^{-1}$.



Рис. 1. Диаграмма энергетических уровней для кластера $\text{Cu}_7\text{Al}_6\text{O}_{14}^{-1}$

Стрелками показаны заселенности уровней электронами со спином «вверх» и со спином «вниз». Величина щели LUMO-НОМО составляет $\Delta = 3.333421$ eV, что вполне согласуется с экспериментальными результатами. Однако, как видно из рисунка, верхний уровень валентной зоны полностью занят. И если предположить, что образец чистый не содержащий примесей, то не совсем ясен механизм p – проводимости данного соединения. В настоящее время в

данном направлении ведутся исследования. Были выполнены, в частности, расчеты энергетических диаграмм для дефектной структуры.

УДК 535.378

МЕХАНИЗМЫ ВОЗБУЖДЕНИЯ СОНОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ НЕЛЕТУЧИХ СОЕДИНЕНИЙ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ В РАСТВОРАХ СЕРНОЙ КИСЛОТЫ¹

Гареев Б.М., Абдрахманов А.М., Шарипов Г.Л.

*Институт нефтехимии и катализа РАН
450075, г. Уфа, пр. Октября, д. 141
e-mail: ink@anrb.ru*

Одной из нерешенных проблем сонохимии является механизм появления полос и линий металлов в спектрах сонолюминесценции растворов их соединений. Выяснение причин такого свечения при ультразвуковой кавитации, необходимо для понимания механизмов сонохимических реакций.

В данной работе были исследованы нелетучие соли лантанидов, урана и щелочных металлов при малых концентрациях в 75% растворе серной кислоты в режиме однопузырьковой сонолюминесценции.

Было установлено, что при однопузырьковой сонолюминесценции в режиме движения для растворов, содержащих ионы Tb^{3+} , UO_2^{2+} и Na^+ в 75% серной кислоте, появление линий ионов и атомов металлов обусловлено внутривузырьковым возбуждением даже при малых концентрациях (до 10^{-3} моль/л) в результате попадания микрокапель раствора внутрь кавитационных пузырьков. Механизм сонофотолюминесценции для этих f-f ионов лантанидов не работает ввиду слабого поглощения сонолюминесценции растворителя и малых квантовых выходов люминесценции этих ионов. Для раствора, содержащего ионы Ce^{3+} , появление полосы этого d-f иона обусловлено только сонофотолюминесценцией, так как механизм внутривузырькового ударного возбуждения для него не эффективен, но существует хорошее поглощение сонолюминесценции растворителя и высокий квантовый выход люминесценции данного иона.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 17-42-020200\17

УДК 544.723.3

ДЕСОРБЦИЯ ЭРИТРОМИЦИНА С МОНОЛИТНЫХ МОЛЕКУЛЯРНО ИМПРИНТИРОВАННЫХ СОРБЕНТОВ

Гаркушина И.С.^а, Полякова И.В.^а, Писарев О.А.^{а,б}

^аИнститут высокомолекулярных соединений РАН
199004, г. Санкт-Петербург, В.О. Большой проспект, д. 31

^бСанкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
195251, г. Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29
e-mail: irin-g16@yandex.ru

Важной частью процесса препаративного высокоселективного сорбционного выделения БАВ является десорбция целевого вещества с сохранением структуры и, соответственно, биологической активности. Для увеличения селективности сорбции широко используются молекулярно импринтированные сорбенты (МИС). Однако, десорбция с селективных импринт-сайтов мало изучена. При исследовании градиентным элюированием (вода-ацетонитрил от 0 до 100 об.%) десорбции антибактериального антибиотика эритромицина с монокристаллических МИСов и контрольного полимера (КП) была показана общая тенденция: наибольшее количество эритромицина десорбировалось с увеличением концентрации ацетонитрила до 62 об.%. В случае КП при элюировании эритромицина градиентом ацетонитрила 0-62 об.% наблюдалось формирование только одного концентрационного профиля. В то время, как для МИСов элюционный фронт разделялся на два профиля: один при концентрации ацетонитрила 0-40 об.% и второй – 40-62 об.%. При этом, наблюдалась зависимость от количества эритромицина введенного при синтезе: с ростом количества антибиотика увеличивался концентрационный профиль 40-62 об.% ацетонитрила. Таким образом, показана возможность высокоселективной десорбции эритромицина только с импринт-сайтов МИСов.

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ СМЕСЕЙ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ МЕТОДОМ ЯМР

Гибайдуллин А.Н., Филиппов А.В.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет
420008, г. Казань, ул. Кремлевская 16а, Институт физики
e-mail: amalgiba@gmail.com*

Ионными жидкости представляют из себя соли с температурами плавления ниже 100°C. Они привлекают к себе огромный интерес, который объясняется большим количеством уникальных физико-химических свойств, среди которых высокая химическая и электрохимическая стабильность, высокая ионная проводимость, термическая стабильность, тугоплавкость, нелетучесть, и т.д. [1]. Наличие этих свойств и разнообразие разновидностей ионных жидкостей увеличивают количество потенциальных областей применения этих соединений.

Для исследования структурно-динамических свойств ионных жидкостей использовался метод ядерного магнитного резонанса с импульсным градиентом магнитного поля (ЯМР ИГМП), который положительно себя зарекомендовал в изучении этих объектов [2]. Были проведены измерения коэффициента самодиффузии в смесях ионных жидкостей [C₅C₁Im][BMB]/[C₅C₁Im][BOB], [C₇C₁Im][BMB]/[C₇C₁Im][BOB], [C₁₀C₁Im][BMB]/[C₁₀C₁Im][BOB] в диапазоне концентраций от 0 до 100%.

Литература

1. Shah F.U. et al. Halogen-free chelated orthoborate ionic liquids and organic ionic plastic crystals. Journal of Materials Chemistry, 2012. V. 22. № 14. P. 6928-6938.
2. Weingärtner H. NMR studies of ionic liquids: Structure and dynamics. Current opinion in colloid & interface science, 2013. V. 18. № 3. P. 183-189.

УДК 544.723.162

ВЛИЯНИЕ ЖЕСТКОСВЯЗАННОЙ ВОДЫ В ЦЕЛЛЮЛОЗЕ С РАЗЛИЧНЫМИ СТЕПЕНЯМИ КРИСТАЛЛИЧНОСТИ НА ЯМР-ХАРАКТЕРИСТИКИ

Гогелашвили Г.Ш., Ладычук Д.В., Грунин Ю.Б., Целищева Л.В., Кречетова И.В.

*Поволжский государственный технологический университет
424000, г. Йошкар-Ола, пл. Ленина, д. 3*

В работе изучено влияние количества жесткосвязанной воды в образцах целлюлозы с различными степенями кристалличности на ее ЯМР-характеристики. Измерение времен ЯМР-релаксации протонов в исследуемых образцах проведено по стандартным методикам на спектрометре с рабочей частотой 37 МГц.

Известно, что жесткосвязанной называется вода, которая не удаляется из целлюлозы при ее сушке при температуре 105°C в течение 4 часов [1]. При совмещении метода импульсного ЯМР и метода дейтерирования, было обнаружено, что количество жесткосвязанной воды в различных видах высушенной целлюлозы колеблется в пределах 0.5-2.5% [2,3]. Дальнейшие исследования показали, что жесткосвязанная вода удаляется из целлюлозы в температурном интервале 160-180°C. Данный факт четко наблюдается на зависимостях времен спин-спиновой (T_2) и спин-решеточной (T_1) релаксации от влажности. В свою очередь, зависимость времени спин-решеточной (T_1) релаксации от степени кристалличности целлюлозы имеет возрастающий, но нелинейный характер, так как в данном случае основной вклад вносит наличие именно жесткосвязанной воды. Впоследствии, опираясь на теорию быстрого обмена, были разделены вклады во времена спин-решеточной (T_1) релаксации от протонов целлюлозы и жесткосвязанной воды.

Литература

1. Рейзиньш Р.Э., Бремзе И.Я. Температурная зависимость десорбции воды из древесной целлюлозы выше 100 С. Материалы I Всесоюзной конференции по химии и физике целлюлозы. Рига, 1975. Ч. 2. С. 164-168.
2. Гогелашвили Г.Ш., Ладычук Д.В., Грунин Ю.Б., Вартапетян Р.Ш. Журнал физической химии, 2002. Т. 62. № 11. С. 2094-2095.
3. Гогелашвили Г.Ш. Исследование надмолекулярной структуры целлюлозы и материалов на ее основе импульсным методом ЯМР: Автореферат дис. ... канд. хим. наук. Йошкар-Ола: МарГТУ, 1996.

УДК 544.723:539.143.43

ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТОЯНИЯ СОРБИРОВАННОЙ ВОДЫ В МИНЕРАЛЬНЫХ АДсорбЕНТАХ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ ПОЛИМЕРНЫМ ПАВ ИМПУЛЬСНЫМ МЕТОДОМ ЯМР

Гогелашвили Г.Ш.^а, Ладычук Д.В.^а, Хозин В.Г.^б, Масленников А.С.^а,
Грунин Ю.Б.^а

^аПоволжский государственный технологический университет
424000, г. Йошкар-Ола, пл. Ленина, д. 3

^бКазанский государственный архитектурно-строительный университет
420043, г. Казань, ул. Зеленая, д. 1

В работе проведены исследования состояния сорбированной воды на частицах минеральных адсорбентов (силикатного стекла, микрораморов Коелга, ОМУА, РИФ) в присутствии полимерного ПАВ (полиметиленафталинсульфоната натрия, СПАВ = 0-5%). Параметры ЯМР-релаксации протонов сорбированной воды на ЯМР-спектрометре с рабочей частотой 20 МГц измерены по известным методикам. Изотермы адсорбции (ИА) паров воды для образцов, измеренные изопиестическим методом, относятся к III типу, характерному для непористых адсорбентов, из ИА рассчитаны сорбционные и структурные параметры минералов. Из зависимостей $T_2 = f(w)$ найдено, что до 15%-ой влажности образцов (50-60 слоев молекул воды) от слоя к слою подвижность воды растет. При дальнейшем росте числа сорбционных слоев, вследствие значительного расстояния от поверхности сорбента, сорбционный потенциал незначителен и мало влияет на подвижность молекул воды. На зависимостях $T_1 = f(\text{СПАВ})$ в системе вода-ПАВ имеется четко выраженный максимум при СПАВ = 3%. Очевидно, сначала в растворе образуются мицеллы из молекул ПАВ, обращенные гидрофильными концами внутрь, а гидрофобными наружу, вследствие чего ассоциаты молекул воды в прилегающих слоях деформируются и разрушаются, что приводит к росту времен T_1 . Выше СПАВ=3% происходит перестройка мицелл с поворотом молекул гидрофильной частью наружу и образованием водородных связей с молекулами воды, и, вследствие быстрого обмена намагниченностью, время T_1 уменьшается. Из зависимостей $T_{1,2} = f(\text{СПАВ})$ в системе вода-адсорбент-ПАВ при 15%-ой влажности образцов найдено, что до СПАВ = 1% происходит значительное (в 3-5 раз) уменьшение подвижности молекул воды. Дальнейшее увеличение концентрации ПАВ не приводит к значительным изменениям времен релаксации и, соответственно, подвижности молекул воды.

УДК 539.143.43:539.199

РАСЧЕТ И АНАЛИЗ СИГНАЛА СОЛИД-ЭХА В ТРЕХСПИНОВОЙ СИСТЕМЕ¹

Голубева И.Ю.^а, Карнаух Г.Е.^б, Кулагина Т.П.^б

^аМосковский государственный университет им. М.В. Ломоносова

119991, г. Москва, Ленинские горы, д. 1

^бИнститут проблем химической физики РАН

142432, г. Черноголовка, пр. Ак. Семенова, д. 1

e-mail: tan@icp.ac.ru

В работе применен новый метод расчета сигналов спада свободной индукции (ССИ) и солид-эха (СЭ) в спиновых системах, основанный на теореме о приведении [1]. Теорема о приведении показывает возможность разбиения пространства всех спиновых состояний R на два подпространства состояний, четных R_1 и нечетных R_2 , относительно переворота всех спинов вокруг одной оси ($R = R_1 \oplus R_2$). Теорема применима для решения всех задач с начальной поляризацией и импульсами, направленными вдоль этой оси и позволяет существенно упрощать расчеты для любой многоспиновой системы.

Этот метод позволил свести вычисление сигнала СЭ в трехспиновой системе от матрицы 8-го порядка к расчету на матрицах четвертого порядка. Расчеты проведены для спиновых систем с произвольными значениями констант диполь-дипольного взаимодействия (ДДВ).

Проведен анализ полученного сигнала солид-эха и установлена природа организации компонент этого сигнала.

Литература

1. Голубева И.Ю., Карнаух Г.Е., Кулагина Т.П. Сборник статей международной исследовательской организации «Cognitio». М., 2017. С. 72.

¹ Работа выполнена в рамках Госзадания ФАНО, № 0089-2014-0021

УДК 221.112

ИЗУЧЕНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ И ЕЕ ЭВОЛЮЦИИ В ПРОЦЕССЕ ФИЗИЧЕСКОГО СТАРЕНИЯ ПОЛИУРЕТАНОВ¹

Горбунова М.А.^а, Анохин Д.В.^{а,б}, Зайцев В.Ю.^б, Комратова В.В.^а, Грищук А.А.^а,
Лесничая В.А.^а, Бадамшина Э.Р.^а

*^аИнститут проблем химической физики РАН
142432, г. Черноголовка, пр. Ак. Семенова, д. 1*

*^бМосковский государственный университет им. М.В. Ломоносова
119991, г. Москва, Ленинские горы, д. 1
e-mail: zav@icp.ac.ru*

Старение полимеров – медленный многостадийный процесс, зависящий от многих факторов, влияющий на долговечность и надежность используемых полимеров в промышленности, и, к сожалению, не до конца изученный, особенно для частично-кристаллизующихся полимеров, в частности, сегментированных полиуретанов (СПУ). Ранее нами было показано, что в ходе хранения СПУ при комнатной температуре в течение 60 месяцев происходит изменение структуры, а также физико-механических и теплофизических характеристик материала [1].

В настоящей работе детально изучена структура, морфология и кинетика кристаллизации полиуретанов с кристаллизующимися мягкими блоками в процессе физического старения при различных температурах как неориентированных пленок, так и в процессе вытяжки. Обнаружен эффект улучшения кристаллической структуры и степени кристалличности в процессе длительного хранения (более 60 месяцев), а также увеличение размера доменов мягкого блока. Обнаружено три типа морфологии, определяющих сложное механическое поведение СПУ. Установлена зависимость времени старения и кинетики кристаллизации при различных температурах выдержки. Выявлена взаимосвязь между процессами кристаллизации и фазового разделения, позволяющая объяснить необычное механическое и теплофизическое поведение полиуретанов в процессе физического старения.

Литература

1. Anokhin D.V. et al. Physical Chemistry Chemical Physics, 2016. 18 (46). P. 31769-31776.

¹ Работа выполнена по теме Госзадания, № гос. регистрации 01201361836

УДК 538.22

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЙ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ОДНОСТЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ПО МЕРЕ РОСТА НАНОТРУБОК

Григорьева А.В., Миронов Г.И.

Марийский государственный университет
424000, г. Йошкар-Ола, пл. Ленина, д. 1
e-mail: alevtina-grigoreva1305@mail.ru

Работа посвящена теоретическому исследованию изменения электронной структуры одностенных углеродных нанотрубок типа «кресло» и «зигзаг» по мере роста нанотрубок. Для этого были вычислены антикоммутирующие функции Грина, построены энергетические спектры, определен графический вид уравнения на химический потенциал для углеродных нанотрубок типа *armchair* (6,6), содержащих 36, 60, 84 и 96 атомов и нанотрубок типа *zigzag* (6,0), содержащих 24, 60, 72 атома. Вычислена энергия основного состояния для углеродных нанотрубок.

При построении теоретической модели мы исходили из предположения, что в нанотрубках в результате s-p гибридизации определяющую роль играют π -электроны, поскольку энергия σ -электронов лежит ниже энергии π -электронов [1]. Совокупность электронов представляет собой сильнокоррелированную систему, для описания которой можно использовать модель Хаббарда [2]. Вычисления проводятся в приближении статических флуктуаций [3].

Литература

1. Дьячков П.Н. Электронные свойства и применение нанотрубок. Бином, М., 2011. 488 с.
2. Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands. Proceedings of the Royal Society A, 1963. V. 276. P. 238-257.
3. Миронов Г.И. Углеродные кольца нанотрубок в модели Хаббарда. Сб. статей «Структура и динамика молекулярных систем», 2007. С. 706.

УДК 543.421

ВАРИАТИВНОСТЬ РОЛИ ВОДЫ В ГИДРАТООБРАЗОВАНИИ¹

Гринвальд И.И., Калагаев И.Ю., Спирин И.А., Грушевская А.И., Капустин Р.В.

*Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева
603950, г. Нижний Новгород, ул. Минина, д. 24*

Механизм гидратообразования представляет особый интерес ввиду того, что исключить влияние воды на процессы, протекающие в конденсированной, а в ряде случаев и в газовой фазе невозможно. С прикладной точки зрения этот вопрос интересен для ряда важных процессов, таких как получение веществ высокой чистоты, разделение газов с помощью полимерных мембран, получение биологически активных компонентов.

В настоящей работе представлен разработанный авторами общий подход и экспериментальные данные по исследованиям методом Фурье ИК-спектроскопии в сочетании с неэмпирическими расчетами в рамках теории функционала плотности *аква*-комплексов органических и неорганических систем в различных агрегатных состояниях: газообразных NH_3 и CO_2 , кристаллических NaOH , Na_2CO_3 и NaNO_3 , жидких CHCl_3 , CHBr_3 , CH_2Cl_2 , CH_2Br_2 , CH_2I_2 , CH_3NO_2 и CH_3CN , а также C_6H_6 , $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$, C_6F_6 , $\text{C}_4\text{H}_4\text{O}$, $\text{C}_4\text{H}_4\text{S}$, ионных жидкостей (1-бутил-3-метилимидазолий хлорид) и (1-бутил-3-метилимидазолий тетрафторборат).

При регистрации спектров применялась техника матричной изоляции в твердых таблетках бромистого калия при комнатной температуре и низкотемпературных пленках в интервале температур 90-200 К.

Можно выделить четыре области, в которых наблюдаются изменения при взаимодействии с водой: 3600-3400, 3100-2900, 2600-2300 и 1400-1100 cm^{-1} . По поведению ИК-полос поглощения можно сделать достаточно точное заключение о роли воды в механизме комплексообразования, а также о степени переноса протона в гидрате. Изученные системы в некоторых случаях могут взаимодействовать с водой по нескольким конкурирующим механизмам. Квадратовхимические расчеты в рамках теории DFT подтверждают выводы, сделанные на основе спектральных измерений.

¹ Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 15-08-05494-а, и Госзадания Минобрнауки России, проект № 2897

ИЗМЕРЕНИЕ КРИСТАЛЛИЧНОСТИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ В УСЛОВИЯХ ИНДУСТРИЛЬНОГО ON-LINE КОНТРОЛЯ¹

Грунин Л.Ю.

*Resonance Systems GmbH
Seestrasse 28, D-73230, Kirchheim/Teck, Germany
e-mail: mobilenmr@hotmail.com*

Знание структурной организации полимеров остается одним из самых

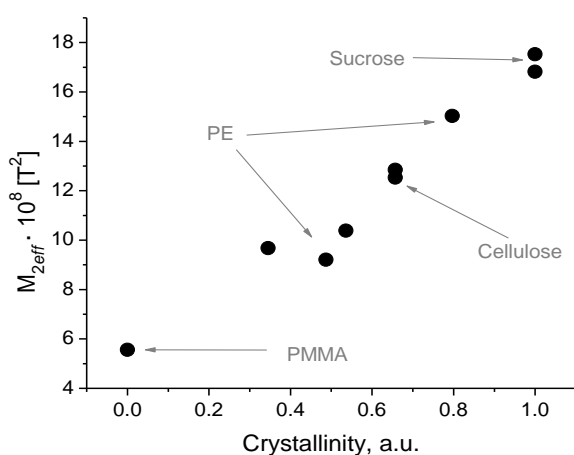


Рис. 1. Зависимость эффективного второго момента линии ЯМР от кристалличности для образцов разной природы

востребованных вопросов за последние 40 лет, и его важность постоянно возрастает из-за необходимости внедрения новых материалов. Большинство полимерных материалов обладают полукристаллической структурой, что означает, что они имеют как более (кристаллические), так и менее (аморфные) упорядоченные области.

В работе рассмотрены различные подходы к измерению массового содержания кристаллической фазы,

найден и объяснен алгоритм, позволяющий определять кристалличность веществ различной природы с точностью лучше, чем 2-3%, базирующийся на использовании величины статического предела значения второго момента спектра образца (рис. 1).

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Resonance Systems GmbH

НАДМОЛЕКУЛЯРНАЯ СТРУКТУРА И СОРБЦИОННЫЕ СВОЙСТВА УВЛАЖНЯЮЩЕЙСЯ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ

Грунин Ю.Б.^а, Грунин Л.Ю.^б, Масас Д.С.^а

^аПоволжский государственный технологический университет
424000, г. Йошкар-Ола, пл. Ленина, д. 3

^бResonance Systems GmbH
Seestrasse 28, D-73230, Kirchheim/Teck, Germany
e-mail: GruninYB@volgatecn.net, mobilenmr@hotmail.com

Дана краткая характеристика особенностей слоистого строения микрофибрилл целлюлозы. Предлагается механизм специфических адсорбционных взаимодействий молекул воды в монослое с активными центрами, располагающихся в гидрофильных плоскостях элементарных фибрилл. Подчеркивается доминирующее участие в этом процессе плоскостей типа $(1, -1, 0)$ и $(-1, 1, 0)$, а также $(1, 1, 0)$ и $(-1, -1, 0)$. Установлено, что в микропористых областях кристаллитов целлюлозы формируются адсорбционные слои Гиббса и дан расчет теплот адсорбции и энтропии адсорбата в указанных слоях с использованием теории ЯМР-релаксации в мультифазных системах и термодинамики адсорбционных процессов в индивидуальных слоях Лэнгмюра. На основе теории поверхностных явлений показана возможность оценки расклинивающего давления, приводящего к диспергированию кристаллитов микрофибрилл целлюлозы. Показана возможность оценки границ подобного диспергирования в ходе увлажнения целлюлозы. Разработана методика определения удельной поверхности микро- и мезопор увлажняющегося целлюлозного адсорбента. В работе делается попытка усовершенствования метода БЭТ для определения параметров, характеризующих особенность надмолекулярной структуры целлюлозы и специфику ее гидрофильных свойств.

УДК 541.64

ИССЛЕДОВАНИЕ НАДМОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ АМФИФИЛЬНЫХ БЛОК-СОПОЛИМЕРОВ НА ОСНОВЕ 2,4- ТОЛУИЛЕНДИИЗОЦИОНАТА И МАКРОИНИЦИАТОРА С РАЗЛИЧНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ КОНЦЕВЫХ ОКСИЭТИЛЕНОВЫХ ЗВЕНЬЕВ

Давлетбаева И.М., Зарипов И.И., Джаббаров И.М., Файзулина З.З.,
Шамсутдинова Р.А., Сазонов О.О.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет
420015, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68
e-mail: davletbaeva09@mail.ru*

Целью данной работы является исследование влияния периферийных блоков оксида этилена в составе макроинициатора, представляющего собой калий-замещенные блок-сополимеры оксидов этилена и пропилена с содержанием концевых полиоксиэтиленовых (ПОЭ) составляющих 15%, 20%, 30% и 40%, на особенности полиприсоединения 2,4-толуилендиизоцианата (ТДИ), на формирование надмолекулярной структуры и свойства полимеров.

Для исследования особенностей надмолекулярной организации серии пленочных пористых полимерных материалов были использованы методы измерения температурных зависимостей тангенса угла диэлектрических и механических потерь. Было установлено, что при формировании надмолекулярной структуры полимеров происходит микрофазовое разделение не только гибкоцепного и жесткоцепного блоков, но и выделение в собственную микрофазу полиоксипропиленовой и полиоксиэтиленовой составляющих. Так, при содержании ПОЭ в области 30-40% упаковка жестких блоков является более рыхлой вследствие того, что полиоксиэтиленовая и полиоксипропиленовая составляющая сосуществуют в общем микрофазовом состоянии.

Разделение полиоксипропиленовой и полиоксиэтиленовой составляющих при содержании ПОЭ 15-20% ведет к каркасной упаковке О-полиизоцианатных сегментов с меньшими возможностями для проявления свойств гибкоцепной составляющей.

УДК 532.783

НАНОСТРУКТУРЫ В НЕМАТИЧЕСКОМ ЖИДКОМ КРИСТАЛЛЕ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕДелев В.А., Тимиров Ю.И.

*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН
450075, г. Уфа, пр. Октября, д. 71
e-mail: deleev@anrb.ru*

Одной из фундаментальных проблем в исследовании жидкокристаллических систем с наночастицами является объяснение влияния наночастиц на динамику переориентации молекул жидкого кристалла в электрическом поле [1]. Изменение свойств жидких кристаллов несинтетическим способом – путем добавления в них наночастиц расширяет возможности их использования в различных технических приложениях.

В данной работе изучается взаимодействие магнитных наночастиц размером 50 нм, изолированных карбоновой оболочкой, с жидким кристаллом МББА вблизи точки просветления. В работе также исследуются возрастание ориентационной упорядоченности композитной системы в магнитном поле, смещение точки перехода из упорядоченной фазы в изотропную, уровень снижения управляющих полей, а также влияние наночастиц на электрооптический и электромагнитный отклик НЖК.

Литература

1. Shiraishi Y., Toshima N., Maeda K. et al. Applied Physics Letters, 2002. 81. P. 2845.

УДК 547.541.127

**ЦИКЛИЧЕСКИЕ АМИННЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ В РЕАКЦИИ
УРЕТАНООРАЗОВАНИЯ ИЗОФОРОНДИИЗОЦИАНАТА¹**

Джалмуханова А.С., Лодыгина В.П., Комратова В.В., Карпов С.В.,
Бадамшина Э.Р.

*Институт проблем химической физики РАН
142432, г. Черноголовка, пр. Ак. Семенова, д. 1
e-mail: aygulik@mail.ru*

Полиуретаны (ПУ) – это полимеры, проявляющие уникальный комплекс физических и химических свойств. При синтезе ПУ в качестве катализаторов часто используют оловоорганические соединения. При создании биоматериалов и когда присутствие оловоорганических катализаторов не желательно наиболее предпочтительными являются аминные катализаторы. Кроме того, ранее изученная нами кинетика взаимодействия ИФДИ присутствии дибутилдилауратолово (ДБДЛО) и 1,4-диазобицикло-[2.2.2]-октан (ДАБКО) показала, что селективностью NCO-групп изофоронодиизоцианата (ИФДИ) в реакциях со спиртами можно управлять, варьируя природу катализатора [1]. В связи с этим *целью данной работы* является исследование кинетических закономерностей уретанообразования ИФДИ с моноспиртами в присутствии ряда циклических аминных катализаторов: ДАБКО, 1,5-диазабицикло[2,3,0]нон-5-ен (ДБН) и 1,8-диазабицикло[5,4,0]ундек-7-ен (ДБУ).

Установлено, что в случае катализа уретанообразования с ДБУ и ДБН происходит их дезактивация в результате взаимодействия с диизоцианатом. Каталитическая активность ДБУ и ДБН в реакции уретанообразования ИФДИ на два порядка выше, чем ДАБКО.

Литература

1. Карпов С.В., Лодыгина В.П., Комратова В.В., Джалмуханова А.С., Малков Г.В., Бадамшина Э.Р. Кинетика и катализ, 2016. Т. 57. № 4. С. 429-435.

¹ Работа выполнена по теме Госзадания, № гос. регистрации 01201055317

УДК 541.182.4.004.94

МАССООБМЕН ЭМУЛЬГИРОВАННЫХ ГЕРБИЦИДОВ МЕЖДУ ПОВЕРХНОСТЬЮ РАСТЕНИЯ И ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДОЙ

Дзарданов Д.В.^{а,б}, Высоцкий В.В.^б, Полунина И.А.^б^аАО Фирма «Август»

129515, г. Москва, ул. Цандера, д. 6

^бИнститут физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН

119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4

e-mail: dzardanov@list.ru

Методом растровой электронной микроскопии исследованы осадки, сформированные после нанесения опытных образцов эмульсий гербицидов (граминицидов I и II, «Август», РФ), отличающихся составом ПАВ, на листовую поверхность однолетнего злакового сорняка Щетинника зеленого (*Setaria viridis*). ПАВ играют роль эмульгаторов при разведении водой концентратов эмульсий гербицидов, они существенным образом влияют как на смачивание каплями эмульсии поверхности листьев, так и на структуру осадков, образующихся после испарения капель. Эти осадки сорбируются кутикулой растения и влияют на биоодоступность действующих веществ гербицида. Оценка структурной формы осадка, образуемого после высыхания рабочего раствора на поверхности растения, позволяет не только качественно сравнить эффективность препаратов, но и оценить оптимальность выбора компонентов рецептуры.

Установлено, что структура осадков и границы капель различных граминидов кардинально отличаются друг от друга. Осадок граминидов I распределен равномерно и визуальная упорядоченность структуры не отмечена, что характерно для эффективной диффузионной структуры. В осадке граминидов II наблюдается существенная кристаллизация действующего вещества по контуру высыхания капли. Это переводит граминид II в труднодоступную форму и уменьшает его биологическую эффективность в полевых экспериментах.

СРАВНИТЕЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОК, МОДИФИЦИРОВАННЫХ В ПЛАЗМЕ ВЫСОКОЧАСТОТНОГО РАЗРЯДА

Дудочкина Д.П., Щербина А.А.

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4
e-mail: ddudochkina@mail.ru*

Модификация поверхности полимерных материалов в плазме газовых разрядов с целью придания им требуемых функциональных свойств широко используется в настоящее время в разных областях полимерного материаловедения. Целью настоящей работы является изучение кинетики формирования и старения поверхности ПЭ и ПВХ.

Поверхность пленок обрабатывали в плазме высокочастотного (ВЧ) воздушного разряда. Поверхностную энергию образцов определяли методом краевых углов смачивания набором тестовых жидкостей на автоматической установке FM40 EasyDrop, Kruss GmbH. Величину поверхностной энергии и ее составляющих рассчитывали в рамках подхода Оуэнса-Вендта. Структуру и морфологию поверхности исследовали с помощью электронного микроскопа TEM-30 Philips. Кинетику травления определяли гравиметрическими измерениями на аналитических весах ME235P, SARTORIUS, чувствительностью 10^{-5} г.

Получены линейные скорости травления для образцов. Показано, что в результате травления, на поверхности пленок образуется специфический доменный рельеф, связанный с надмолекулярной организацией полимеров. Одновременно наблюдается улучшение смачиваемости, что связано с образованием на протравленной поверхности азот и кислород - содержащих функциональных групп. Показано, что в отсутствие плазмы газового разряда наблюдается релаксация поверхностных свойств для ПЭ и ПВХ.

УДК 541.64: 66.095.26

ОСОБЕННОСТИ СТРОЕНИЯ ГИПЕРРАЗВЕТВЛЕННЫХ АМИНОЭФИРОВ БОРНОЙ КИСЛОТЫ

Дулмаев С.Э., Емелина О.Ю., Сазонов О.О., Каюмов М.Н., Давлетбаева И.М.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет
420015, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68*

Целью данной работы явилось исследование особенностей химического строения и топологии АЭБК с использованием методов динамического светорассеяния и ЯМР ^{11}B .

На основе борной кислоты, триэтаноламина и гидроксилсодержащих соединений различной молекулярной массы получены гидролитически стабильные гиперразветвленные аминокислоты борной кислоты (АЭБК), содержащие терминальные гидроксильные группы.

С использованием ЯМР ^{11}B спектроскопии и динамического светорассеяния были получены сведения о строении и реакционной способности АЭБК. Было установлено, что аминокислоты борной кислоты образуют межмолекулярные комплексы и имеют наряду с гидроксильными реакционноспособными связями В-ОН.

При исследовании размерного распределения по интенсивности частиц для АЭБК-3 и АЭБК-6, методом динамического светорассеяния в воде. Оказалось, что АЭБК-3 и АЭБК-6 формируют довольно крупные кластерные объединения. Средний размер кластеров для АЭБК-3 составляет 600 нм, а для АЭБК-6 растет до 1000 нм. Так как измерения методом динамического светорассеяния проводились в разбавленных водных растворах, можно утверждать, что комплексообразующие взаимодействия в АЭБК являются прочными. В свою очередь, существование связей В-О-С внутри объемной и прочной кластерной структуры предупреждает реакции гидролиза, легко протекающие для «не защищенных» эфиров борной кислоты.

УДК 535.37

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ СУЛЬФИДА ЦИНКА ДОПИРОВАННЫЕ ИОНАМИ МЕДИ¹

Жукова К.О., Шамилов Р.Р., Галяметдинов Ю.Г.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет
420015, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68*

Полупроводниковые наночастицы (квантовые точки) содержащие примесные ионы, такие как марганец и медь привлекают интерес в связи с влиянием на оптические свойства материала-хозяина, а также проявлением парамагнитных свойств. Это открывает возможности их использования в спинтронике и при мультимодальной диагностике биообъектов.

В рамках данной работы коллоидным методом получены наночастицы сульфида цинка, содержащие ионы меди. Проведены исследования размерно-оптических свойств полученных квантовых точек, в зависимости от концентрации внедренного иона и времени синтеза. Показано, что допирование ионов меди приводит к появлению полосы фотолюминесценции в длинноволновой области, с одновременным снижением интенсивности люминесценции запрещенной зоны сульфида цинка.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 17-03-00258-А

ИССЛЕДОВАНИЕ СОРБЦИОННОЙ АКТИВНОСТИ МЕЗОПОРИСТЫХ ПОЛИМЕРОВ НА ОСНОВЕ 2,4- ТОЛУИЛЕНДИИЗОЦИАНАТА И МАКРОИНИЦИАТОРА С РАЗЛИЧНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ КОНЦЕВЫХ ОКСИЭТИЛЕНОВЫХ ЗВЕНЬЕВ

Зарипов И.И., Джаббаров И.М., Исхаков А.Ф., Файзулина З.З., Давлетбаева И.М.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет
420015, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68*

Путем измерений водопоглощения, краевого угла смачивания водой, толуолом и эффективности сорбции родамина 6G исследованы серии пленочных пористых полимерных материалов, полученных путем полиприсоединения 2,4-толуиленидиизоцианата (ТДИ) к макроинициаторам анионной природы, представляющим собой блок-сополимеры оксида пропилена и оксида этилена (ППЭГ с ММ = 4200) с содержанием концевых полиоксиэтиленовых (ПОЭ) составляющих 15%, 20%, 30% и 40%, часть гидроксильных групп которого замещена на калий-алкоголятные.

Установлено, что увеличение количества оксиэтиленовой составляющей в составе макроинициатора приводит к росту гидрофильности поверхности получаемых полимеров и уменьшению их свободного объема. Изменения значений краевого угла смачивания отражают особенности выстраивания поверхности пустот, располагающихся на поверхности полимера. Показано влияние содержания количества ПОЭ составляющей на сорбцию красителя Родамина 6G. С увеличением доли ПОЭ до 30-40%, поверхность пор, покрыта преимущественно О-полиизоцианатами, имеющих жесткую структуру. Такие структуры наименее способны удерживать органические молекулы. Показано, что использование сокатализаторов также оказывает значительное влияние на особенности порообразования и увеличения эффективности сорбции Родамина 6G исследуемыми полимерами.

УДК 538.22

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ТИПА ЗИГЗАГ ХИРАЛЬНОСТИ (9,0) В ПРИБЛИЖЕНИИ СТАТИЧЕСКИХ ФЛУКТУАЦИЙ В РАМКАХ МОДЕЛИ ХАББАРДА

Захаров А.В., Миронов Г.И.

*Марийский государственный университет
424000, г. Йошкар-Ола, пл. Ленина, д. 1
e-mail: zahar93n@mail.ru*

Исследована углеродная нанотрубка типа зигзаг хиральности (9,0) в приближении статических флуктуаций в рамках модели Хаббарда, где гамильтониан данной системы будет иметь вид:

$$\hat{H} = \varepsilon \sum_{f,\sigma} a_{f\sigma}^+ a_{f\sigma} + \sum_{f \neq f'} B_{f,f'} (a_{f\sigma}^+ a_{f'\sigma} + a_{f'\sigma}^+ a_{f\sigma}) + U \sum_{f,\sigma} \hat{n}_{f\uparrow} \hat{n}_{f\downarrow}, \quad (1)$$

где ε – собственная энергия электронов, B – интеграл перескока электрона с одного узла на соседний узел ($a_{f\sigma}^+$, $a_{f\sigma}$ – операторы рождения и уничтожения электрона на узле f и со спином σ), U – энергия кулоновского взаимодействия двух π -электронов на одной орбитали с разными направлениями спинов $\sigma = \pm 1/2$.

С помощью приближения статических флуктуаций решена модель Хаббарда для π -электронов. Получены аналитические выражения для Фурье-образов антикоммутирующих функций Грина. Построен энергетический спектр, показано как с увеличением количества атомов изменяется вид спектра элементарных возбуждений.

Получено аналитическое выражение и построены графики для энергий основного состояния, химического потенциала, плотности электронных состояний для π -электронов, показано, как происходит изменение вида представленных графиков по мере роста одностенной углеродной нанотрубки.

УДК 577.352

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИМЕРИЗАЦИИ БИНАЗЫЗахарченко Н.Л., Файзуллин Д.А., Лисевич И., Кусова А.М., Зуев Ю.Ф.

*Казанский институт биохимии и биофизики КазНЦ РАН
420111, г. Казань, ул. Лобачевского, д. 2/31
e-mail: natasha@kibb.knc.ru*

Возможность существования димеров бактериальной РНКазы биназы (продуцент – *Bacillus Pumilus*) в растворе неоднократно обсуждалась исследователями. Было обнаружено наличие димерных форм белка в культуральной жидкости продуцента [1]. В нашей работе исследован процесс димеризации биназы с использованием ряда биофизических методов (УФ спектроскопия, КД спектроскопия, флуоресценция, ЯМР спектроскопия). Показано, что оптические свойства и параметры флуоресценции раствора не изменяются в диапазоне концентраций от 5 мкг/мл до 1 мг/мл. Размер белковой частицы, полученный методом ЯМР спектроскопии, соответствует димерной форме молекулы биназы. Таким образом, предположена возможность существования димеров биназы уже при выходе белка из клеток бактерии продуцента. Полученные результаты позволят глубже понять механизмы проявления цитотоксичности фермента по отношению к опухолевым клеткам.

Литература

1. Dudkina E, Kayumov A, Ulyanova V, Ilinskaya O. New insight into secreted ribonuclease structure: binase is a natural dimer. PLoS One, 2014. 9(12): e115818. DOI: 10.1371/journal.pone.0115818

УДК 543.429.23

**ИЗУЧЕНИЕ АСФАЛЬТЕНОВЫХ АГРЕГАТОВ В СМОЛЕ ПО
ДАНЫМ ЯМР**Иванов Д.С., Скирда В.Д.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет
420111, г. Казань, ул. Кремлевская 16а, Институт физики
e-mail: f.ma.dima@mail.ru*

Принципиальное отличие природных битумов и тяжелой нефти от легкой нефти заключается в том, что в них содержится большое количество асфальто-смолистых веществ. Значительное содержание асфальтено-смолистых веществ неминуемо приводит к проблемам на различных этапах добычи, транспортировки и переработки высоковязкой нефти.

Вышеобозначенные проблемы обуславливают необходимость привлечения физических исследований для лучшего понимания молекулярной и надмолекулярной организации асфальтенов и смол.

Целью настоящей работы является исследования размерного эффекта для частиц асфальтенов в смоле методом ядерной магнитной релаксации.

В результате исследования показано, что для асфальтенов существует размерный эффект, связанный с уменьшением частиц асфальтенов. Данный эффект приводит к росту подвижности асфальтенов, характеризуемым с точки зрения ЯМР-релаксометрии, как лоренцева компонента затухания.

УДК 615

ПРОБЛЕМЫ РЕАЛИЗАЦИИ И ПРОДВИЖЕНИЯ НАУЧНЫХ РАЗРАБОТОК В ОТРАСЛИ МЕДИЦИНЫ

Иванов П.Л.

*Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН
117393, г. Москва, ул. Профсоюзная, д. 70
e-mail: ivanovpl@inbox.ru*

Одним из основных ориентиров в современной экономике для стран с существенным вкладом интеллектуальной составляющей является показатель эффективности инновационной деятельности. Причем современный тренд направлен не столько на увеличение количества успешных разработок, сколько на сокращение разницы показателей «коммерчески успешный проект/ идея». Что примечательно, сейчас этот показатель для большинства стран приблизительно одинаков и находится в пределах $2-3 \cdot 10^{-4}$. При этом по количеству коммерчески успешных проектов США опережает РФ более чем на порядок. Одно из конкурентоспособных направления инновационной деятельности в РФ, заслуживающего отдельного внимания, является отрасль медицины.

В работе анализируются общемировые причины, которые встают на пути коммерчески успешной реализации проекта. Помимо этих факторов, рассматривается роль специфических для российской действительности причин при продвижении медицинской продукции, таких как: административный барьер (регистрация и т.д.), кредитная политика государства и инфраструктура.

В докладе оцениваются плюсы и минусы различных способов и подходов по минимизации вышеописанных причин, такие как: продвижение в бизнес инкубаторе или Технопарке, где созданы целые структуры для отработки технологий инновации, различных консультаций и финансирования проектов; продвижение с помощью частных инновационных компаний (R&D), или приглашение в научную команду R&D-менеджера.

УДК 539.1

ДЕРИВАТИЗАЦИЯ МАРКЕРОВ ФИЗИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ КАК СПОСОБ ПОВЫШЕНИЯ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ МЕТОДА МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ИОНОВИванова М.В.^а, Дьячков А.В.^а, Терентьев А.Г.^б*^аВоенная академия радиационной, химической и биологической защиты им. Маршала Советского Союза С.К. Тимошенко**156013, г. Кострома, ул. Горького, д. 16**^б«27 Научный центр» Минобороны России**1050056 г. Москва, Бригадирский переулок, д. 13**e-mail: tag2278@mail.ru*

При идентификации производных фосфорорганических отравляющих веществ наиболее часто применяется сочетание двух физико-химических методов: газовой хроматографии/масс-спектрометрии. Наиболее весомым достоинством данного сочетания в настоящее время является относительная дешевизна, по сравнению с другими аналитическими методами, например с методами: масс-спектрометрии высокого разрешения, высокоэффективной жидкостной хроматографии в сочетании с ионной ловушкой и др.

Наиболее распространенными маркерами применения фосфорорганических отравляющих веществ являются алкилметилфосфоновые и метилфосфоновая кислоты. Данные соединения ввиду их высокой полярности и труднолетучести разделить и сконцентрировать при газовой хроматографии практически невозможно. Для идентификации данных соединений методами газовой хроматографии/масс-спектрометрии наиболее часто применяют три варианта дериватизации: метилирование, третбутилдиметилсилилирование и пентафторбензилирование.

Ранее авторами было показано, что метод масс-спектрометрии отрицательных ионов резонансного захвата электронов (МС ОИ) имеет ряд преимуществ перед методом масс-спектрометрии электронной ионизации положительных ионов (МС ПИ) при решении аналитических задач, однако в большинстве случаев существенно уступает по чувствительности.

В данной работе авторами исследуются варианты замещения гидроксильных групп алкилметилфосфоновых и метилфосфоновой кислоты на функциональные группы, имеющие высокое положительное значение величины сродства к электрону. Тем самым предлагается решить две задачи: создать условия для хроматографирования и повысить чувствительность метода масс-спектрометрии отрицательных ионов.

УДК 637.043

МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ ОБЩЕГО ЖИРА В ПИЩЕВЫХ ПРОДУКТАХ ПРИ ПОМОЩИ ЯМР-РЕЛАКСАЦИИ

Иванова М.С.^а, Грунин Л.Ю.^б, Халимов М.А.^а

^аПоволжский государственный технологический университет

424000, г. Йошкар-Ола, пл. Ленина, д. 3

e-mail: mariya-ivanova@list.ru

^бResonance Systems GmbH

Seestrasse 28, D-73230, Kirchheim/Teck, Germany

e-mail: mobilenmr@hotmail.com

Определение содержания общего жира находит широкое применение во многих отраслях промышленности, в частности, в пищевой для контроля качества сырья и выпускаемой продукции.

Нами предложен метод по определению содержания общего жира с применением ЯМР-релаксации. Образцы с различным процентным содержанием общего жира (жидкого и твердого) и разным белково-углеводным составом нагревались до температуры перехода твердых жиров в жидкое состояние.

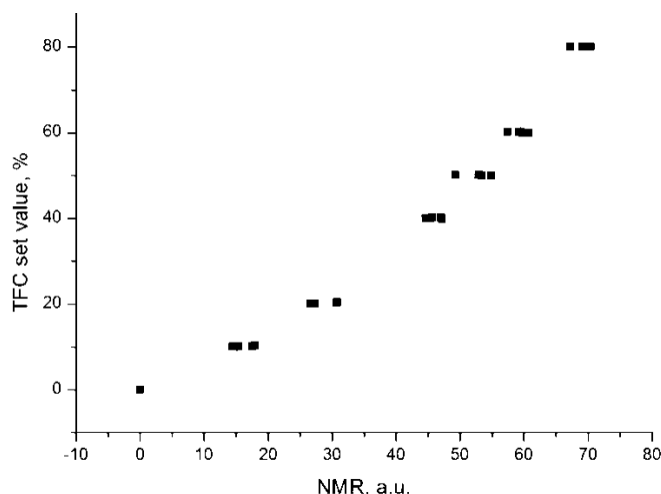


Рис. 1. Аппроксимация Solid Echo-Hahn Echo

Использовались совместно импульсные последовательности – Solid Echo и Hahn Echo. Расчет процентного содержания общего жира производился по отношению амплитуды эхо, вклад в которое, как предполагается, вносит только жир, к амплитуде короткой компоненты, включающей сигналы от всех компонентов образца.

Полученная зависимость, на основе которой возможна разработка методики определения содержания общего жира, приведена на рис. 1. Результаты, полученные методом ЯМР-релаксации, обладают хорошей корреляцией с заведомо известными значениями содержания общего жира в образцах.

ФОТОХРОМИЗМ НОВОГО ДИФИЛЬНОГО СПИРООКСАЗИНА В РАСТВОРАХ И НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА ФАЗ¹

Ивахненко А.А.^а, Волошин Н.А.^б, Арсланов В.В.^в, Райтман О.А.^в

^а*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева
125047, г. Москва, Миусская площадь, д. 9*

^б*Научно-исследовательский институт физической и органической химии,
Южный федеральный университет
344090, г. Ростов-на-Дону, пр. Стачки, д. 194/2*

^в*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4
e-mail: pcss_lab@mail.ru*

Спироциклические соединения, в том числе спиропираны и их производные спирооксазины, представляют собой уникальные молекулярные системы, способные, благодаря своему строению, к резкому изменению физико-химических свойств в результате фотореакции, что открывает широкие перспективы для их применения. Метод монослоев Ленгмюра является достаточно наглядным методом изучения строения мономолекулярных слоев на межфазной границе воздух-вода, а исследования мономолекулярных пленок оптических фотохромов направлены на установление связи между строением этих систем и эффективностью фотохимических превращений в них.

В настоящей работе представлены результаты изучения фотохромных свойств растворов нового дифильного спирооксазина СНО149, а также пленок этого соединения на границе раздела воздух/вода. Проведены сравнительные исследования фотохромизма СНО149 в ацетонитриле, хлороформе и на поверхности водной субфазы. Выявлены кинетические закономерности фотопревращений этого соединения под действием УФ-облучения и темновой релаксации. Анализ изотерм сжатия показал, что при облучении монослоя СНО149 ультрафиолетовым светом площадь, занимаемая молекулой фотохрома на поверхности воды, увеличивается, что свидетельствует о сохранении спиронафтоксазином своих фотохромных свойств при переходе из растворов в двумерное конденсированное состояние. Данный факт свидетельствует о потенциальной возможности применения монослоев из спиронафтоксазинов в качестве рабочих элементов молекулярных механизмов.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-03-01131_А

ФОТОХРОМНЫЕ СВОЙСТВА НОВОГО ДИФИЛЬНОГО СПИРОПИРАНА НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА ВОЗДУХ/ВОДА¹

Ивахненко Д.А.^а, Любимов А.В.^б, Любимова Г.В.^б, Зайченко Н.Л.^б,
Арсланов В.В.^в, Райтман О.А.^в

^аРоссийский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева
125047, г. Москва, Миусская площадь, д. 9

^бИнститут химической физики им. Н.Н. Семенова РАН
119991, г. Москва, ул. Косыгина, д. 4

^вИнститут физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4
e-mail: pcss_lab@mail.ru

Спиропираны и их производные стоят первыми в ряду фотохромных и термохромных соединений, благодаря их высокой квантовой эффективности в реакции фотоизомеризации и высокому выходу фотоиндуцированной мероцианиновой формы. Однако свойства данных соединений на поверхности раздела фаз практически не изучены.

В настоящей работе представлены результаты изучения фотохромных свойств мономолекулярных пленок 1'3'-дигидро-1'-гексадецил-3'3'-диметил-6-нитроспиро [2Н-бензопиран-2,2'-(2Н)индола] (SP1) на границе раздела фаз с помощью метода монослоев Ленгмюра и оптоволоконной спектрофотометрии. Установлено, что SP1 в спироформе не образует устойчивых монослоев на водной субфазе, в то время как мероцианиновая форма этого соединения полностью растекается по поверхности воды и формирует истинный монослой. Кроме того, показано, что при переходе из растворенного состояния в планарное у изучаемого вещества резко возрастает склонность к агрегированию, что подтверждается появлением и ростом полосы поглощения в области 640 нм. Разбавление молекул SP1 цетиловым спиртом позволяет понизить степень агрегации этого соединения в монослой и добиться полного растекания спиропирана по поверхности воды с одновременным сохранением фотохромных свойств вещества в планарном состоянии. Полученные результаты открывают широкие перспективы использования соединений данного класса в качестве рабочих элементов молекулярных механизмов.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-03-01131_А

УДК 54.057, 541.64

НОВЫЕ ГИБКИЕ ПРОВОДЯЩИЕ КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ПОИАНИЛИНА

Исакова А.А.^а, Тверской В.А.^б, Алиев А.Д.^а, Иванов В.Ф.^а, Костина Ю.В.^в,
Грибкова О.Л.^а, Некрасов А.А.^а

^а*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4*

^б*Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова,
Московский технологический университет
119571, г. Москва, пр. Вернадского, д. 86*

^в*Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН
119991, г. Москва, Ленинский проспект, д. 29
e-mail: Isakova_Aleks@list.ru*

Создание гибких устройств отображения и хранения информации побуждает исследователей проводить поиск и синтез новых проводящих композиционных материалов. Нами для синтеза полианилина (ПАНИ) были использованы пленки полиэтилена (ПЭ), модифицированные прививочной полимеризацией стирола и последующим его сульфированием. Привитые фрагменты в протонированном виде представляют фрагменты полистиролсульфокислоты (ПССК). Были использованы поверхностно- и объемно-модифицированные образцы. Для поверхностно-модифицированных ПЭ-ПССК с низкой степенью сульфирования процесс полимеризации анилина останавливается на стадии образования катион-радикальной формы ПАНИ. Анализ ИК-спектров продуктов полимеризации показал, что, вероятно, на них формируются низкомолекулярные фрагменты ПАНИ. В случае синтеза ПАНИ на объемно-модифицированных пленках ПЭ-ПССК показано, что он протекает также, как и синтез ПАНИ в ПССК, с образованием катион-радикальной (~ 430 нм), хинон-иминной (~ 600 нм) и поляронной (~ 750-780 нм) форм ПАНИ. Показано влияние степени сульфирования на скорость полимеризации анилина. Анализ ИК-спектров ПАНИ, синтезированного на объемно-модифицированных пленках ПЭ-ПССК показал наличие характерных полосы поглощения для различных групп ПАНИ (1577, 1482, 1307, 1248, 1148, 823 см⁻¹).

УДК 541.6

КООРДИНАЦИОННЫЕ ПОЛИМЕРЫ ГЕРМАНИЯКадо́мцева А.В.

*Нижегородская государственная медицинская академия Минздрава России
603005, г. Нижний Новгород, пл. Минина и Пожарского, д. 10/1
e-mail: kadomtseva@nizhgma.ru*

В настоящее время определены условия комплексообразования GeO_2 и GeCl_4 с лимонной (H_4Citr), винной (H_4Tart) и ксиларовой (H_5Xylar) кислотами с формированием моно-, ди- и полимерных комплексов.

О комплексообразовании винной кислоты с ионами s-, p- и d-металлов в литературе представлен довольно обширный материал. Соединение $(\text{NH}_4)_{2n}[\text{Ge}_2(\mu\text{-O})(\mu\text{-Tart})_2]_n$ построено из комплексных полимерных анионов $[\text{Ge}_2(\mu\text{-O})(\mu\text{-Tart})_2]_n^{2n-}$, в структуре которых легко выделяются фрагменты аналогичные димерам $[\text{Ge}_2(\text{OH})_2(\mu\text{-Tart})_2]_2$, катионов NH_4^+ и кристаллизационных молекул ацетонитрила и воды, что доказывает проведенное РСА и ИК-спектроскопическое исследования. В комплексном анионе два атома германия связаны двумя тетрадентатными бис(хелатно)мостиковыми лигандами полностью депротонированной винной кислоты. Каждый атом германия координирован двумя карбоксилатными (средн. Ge-O 1.908(3) Å) и двумя спиртовыми (Ge-O 1.778(3) Å) атомами кислорода двух лигандов Tart^{4-} .

Рентгеноструктурный анализ комплекса $[\text{Cu}_2(\text{H}_2\text{O})_{10}\text{Ge}_2(\mu\text{-Tart})_3]_n \cdot 3n\text{H}_2\text{O}$ показал, что структурными единицами его кристалла являются полимерные анионы $[\text{Ge}_2(\mu\text{-Tart})_3]_n^{4n-}$, фрагменты $\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_5$ и кристаллизационные молекулы воды.

Также впервые полученный гетерометаллический координационный полимер $\{[\text{Ge}(\mu\text{-HCitr})_2\text{Ba}(\text{H}_2\text{O})_3] \cdot 3\text{H}_2\text{O}\}_n$, который формируется на основе мономерных бис(цитрато)германатных анионов и катионов бария, в указанном комплексе зафиксирована тридентатно-мостиковая функция карбоксильных групп.

УДК 544.723: 541.64: 544.77: 539.2

СИНТЕЗ, СВОЙСТВА И ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ ГИДРОКСИАПАТИТА, СИНТЕЗИРУЕМОГО В БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНОЙ СРЕДЕ ГИАЛУРОНОВОЙ КИСЛОТЫ

Калмыкова Т.П.^{а,б}, Северин А.В.^а, Костина Ю.В.^б, Иванов П.Л.^в

^а*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
119991, г. Москва, Ленинские горы, д. 1*

^б*Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН
119991, г. Москва, Ленинский проспект, д. 29*

^в*Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН
117393, г. Москва, ул. Профсоюзная, д. 70
e-mail: taisia2906@rambler.ru*

Композиции на основе гидроксиапатита (ГАП) и гиалуроновой кислоты (ГК) являются эффективными стимуляторами регенерации тканей, они обладают рядом биоактивных свойств, при этом не токсичны. Однако биоактивные свойства проявляются наиболее сильно, когда размер частиц ГАП близок к размеру нативного ГАП, присутствующего в человеческом организме. Поэтому создание композиций на основе наноразмерного ГАП является актуальной задачей.

Авторами предложен метод контролируемого синтеза одного компонента (ГАП) в среде другого (ГК), приводящего к образованию биокомпозита, имеющего структурно-размерные характеристики, близкие таким характеристикам нативного ГАП.

Комплексом физико-химических методов установлено, что биоминеральные композиции ГАП-ГК имеют сложноорганизованную структуру коллоидных частиц, не изменяющуюся при разбавлении, которая зависит от условий синтеза и молекулярной массы ГК. Коллоидные системы на основе ГАП-ГК обладают большей стабильностью по сравнению с ГАП, синтезированным в воде. Гистологическое исследование образцов тканей с моделированной патологией пародонтоза у животных после введения препаратов ГАП-ГК показало положительный регенерирующий эффект препарата.

УДК 678.686

ВЛИЯНИЕ ДИСПЕРСНЫХ НАПОЛНИТЕЛЕЙ НА ПОВЕРХНОСТНЫЕ СВОЙСТВА ЭПОКСИДНЫХ ПОЛИМЕРОВ

Камалов А.Н., Ибатуллин И.М., Гафиятуллина С.И., Магсумова А.Ф.

Казанский национальный исследовательский технический университет –

КАИ им. А.Н. Туполева

420111, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 10

e-mail: kamalov_an@mail.ru

Знание величины свободной поверхностной энергии (СПЭ) материала, характеризующей его энергетическое состояние, дает возможность изучить устойчивость поверхности к действию различных жидкостей, процессы адгезионного взаимодействия при склеивании, нанесении покрытий и т.д. В последнее время для регулирования СПЭ полимеров, в частности эпоксиполимеров, используют различные виды дисперсных наполнителей органической и неорганической природы, привлекающие своей ценовой доступностью, приданием материалу прочностных, технологических, эксплуатационных и других специфических свойств.

В настоящей работе изучали поверхностные свойства дисперснонаполненных образцов на основе эпоксидиановой смолы марки ЭД-22 и отвердителя полиэтиленполиамина (ПЭПА). В качестве наполнителя вводили частицы технического углерода различных марок (Т900, П234, К354, П514), шунгита, калия-натрия виннокислого, карбонильного железа (Р-10), никелевого порошка (ПНК УТ-1) и графита (ГЛ-1). Количество наполнителя, вводимого в экспериментальные образцы, составляло от 1 до 30 масс.%. СПЭ полимеров оценивали на приборе EasyDrop с программным обеспечением Drop Shape Analysis путем измерения краевого угла смачивания различными тестовыми жидкостями.

Проанализировано влияние дисперсных наполнителей на величины дисперсионной, полярной составляющих, а также на показатель СПЭ. Приведены зависимости изучаемых величин от концентрации дисперсных наполнителей.

УДК 539

**ВЗАИМОСВЯЗЬ «СТРУКТУРА-СВОЙСТВО» В РЯДУ
АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ¹**Карасева И.Н., Курбатова С.В.

*Самарский университет
443011, г. Самара, ул. Ак. Павлова, д. 1
e-mail: irkaraseva@inbox.ru*

Исследование корреляционных зависимостей между структурой и свойствами соединений различной природы до настоящего времени остается одной из фундаментальных задач современных химии и материаловедения. Решение этой задачи базируется на создании и использовании значительных массивов данных о структуре и свойствах самых разнообразных классов химических соединений. Нами исследована взаимосвязь между строением, физико-химическими параметрами и сорбционными характеристиками производных 1,2,4-триазина, 1,2,4-триазола и 1,3-бензоксазола, имеющих важные с практической точки зрения свойства. С помощью квантовохимических расчетов определены значения поляризуемости, липофильности, дипольного момента и энергии сольватации 24 новых представителей класса азотистых гетероциклов. Показано влияние этих параметров на сорбционные характеристики, экспериментально полученные нами при исследовании сорбции указанных производных из водноацетонитрильных растворов на неполярных сорбентах различной химической природы – октадецилсиликагеле, сверхсшитом полистироле и пористом графитированном углероде – в условиях высокоэффективной жидкостной хроматографии. Установлены влияние стереохимии молекул сорбатов, особенностей сольватации в смеси вода – ацетонитрил, а также роль π -взаимодействий и «эффекта полярного» удерживания в сорбции данных веществ указанными сорбентами.

¹ Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России в рамках Госзадания, грант № 4.5883.2017/8.9

УДК 535.2

ФОТОННОЕ ЭХО В ПОЛИМЕРНЫХ НАНОКОМПОЗИТАХ, ДОПИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫМИ КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ И МЕТАЛЛО-ПОРФИРИНАМИ¹

Каримуллин К.Р.^{а,б}

^аИнститут спектроскопии РАН

108840, г. Троицк, ул. Физическая, д. 5

^бМосковский педагогический государственный университет

119991, г. Москва, ул. Малая Пироговская, д. 1, стр. 1

e-mail: kamil@isan.troitsk.ru

Современное материаловедение и нанотехнологии имеют широчайшие возможности для синтеза сложных молекулярных сред, наноструктур и метаматериалов с уникальными свойствами, в т.ч. перспективных для использования в квантовой оптике, органической фотовольтаике и молекулярной электронике. В настоящее время ведется активный поиск новых сред для однофотонных источников света, ячеек для оптической квантовой памяти и высокопроизводительных систем оптической обработки информации. Вновь синтезируемые материалы и структуры позволяют существенно улучшить характеристики и повысить эффективность работы солнечных батарей, источников света, токопроводящих структур, элементов микроэлектроники. Значительный интерес в данном направлении представляют новые органические материалы: полимеры, стекла, молекулярные кристаллы, допированные различными люминофорами – редкоземельными ионами, органическими молекулами, молекулярными комплексами, полупроводниковыми квантовыми точками и нанокристаллами.

Эффективный и целенаправленный поиск новых материалов с наперед заданными свойствами невозможен без фундаментального исследования их микроскопической структуры и внутренней динамики. По этой причине актуальным является всестороннее исследование спектральных, фотофизических и динамических свойств таких сред. В области лазерной спектроскопии одним из наиболее эффективных направлений экспериментального исследования указанных свойств является селективная спектроскопия примесного центра. Важное значение имеет изучение процессов фазовой релаксации (в частности, оптической

¹ Работа выполнена в рамках проекта РФФИ, № 18-02-01121-а

дефазировки), обуславливающих использование синтезируемых образцов в приложениях когерентной и нелинейной оптики. Информация о таких процессах может быть получена различными методами спектроскопии высокого временного разрешения, включая технику фотонного эха, четырехволнового смешения и другие методы.

Доклад посвящен обсуждению результатов низкотемпературных экспериментов по некогерентному фотонному эху, выполненных в двух полимерных нанокompозитах – тонких пленках, допированных полупроводниковыми коллоидными квантовыми точками CdSe/CdS/ZnS, и молекулами Mg-тетраазопорфирина. В обоих образцах при криогенных температурах зарегистрированы кривые спада сигналов некогерентного фотонного эха и измерены времена фазовой релаксации. Обнаружена быстрая релаксационная динамика с характерными временами порядка сотен фемтосекунд для ансамбля квантовых точек. Возможные причины столь быстрых процессов могут быть связаны с неоднородностью структуры квантовых точек, особенностями внутренней динамики излучающего ядра (например, с эффектом мерцания люминесценции), а также с поверхностными состояниями на оболочках квантовых точек. Кроме того, к быстрой релаксации в ансамбле могут приводить дисперсия по размеру и сильно-неоднородное локальное окружение квантовых точек. Для молекул металлопорфирина получено среднее значение однородной ширины спектрального перехода в сотни ГГц, что хорошо согласуется с результатами исследования спектров возбуждения люминесценции на уровне одиночных молекул, где была зарегистрирована спектральная диффузия в аномально широком спектральном диапазоне (вплоть до 950 ГГц).

УДК 539.143.43:539.199

ФАЗЫ ДЕЙСТВИЯ И ПЕРЕХОДЫ МЕЖДУ НИМИ¹

Карнаух Г.Е.

*Институт проблем химической физики РАН
142432, г. Черноголовка, пр. Ак. Семенова, д. 1
e-mail: karnaikh@icp.ac.ru*

В работе исследуется природа обнаруженного теоретически и экспериментально в монокристалле кизерита ($\text{MgSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$) [1]. Для этого на двухуровневой системе с частотой расщепления ω рассмотрены два примера. С помощью работы [1] и рассмотренных примеров было доказано, что на такой системе может происходить периодическое изменение действия с частотами ω или $\frac{\omega}{2}$ и разрывами первого рода. Оказалось, что в их основе лежит наличие двух фаз действия и периодические переходы между ними. Каждая фаза является упорядоченным множеством своих ветвей. Механизмом перехода является поочередная смена ветвей внутри фаз, которые происходят с частотой $\frac{\omega}{2}$. Эти переходы между фазами всегда сопровождают изменение действия, в частности, эволюцию.

Литература

1. Карнаух Г.Е., Сосиков А.И. Радиоспектроскопия. Пермь, 1985. С. 25-30.

¹ Работа выполнена по теме Госзадания ФАНО, № 0089-2014-0021

УДК 544

**СИНТЕЗ СВЕРХРАЗВЕТВЛЕННЫХ ПОЛИ(УРЕТАН-ТРИАЗОЛОВ)
НА ОСНОВЕ ИЗОФОРОНДИИЗОЦИАНАТА**Карпов С.В., Перепелицина Е.О., Малков Г.В., Бадамшина Э.Р.

*Институт проблем химической физики РАН
142432, г. Черноголовка, пр. Ак. Семенова, д. 1
e-mail: svkarpov@icp.ac.ru*

Разработана методология синтеза новых высокоразветвленных поли(уретан-со-триазолов) с использованием двух количественных управляемых реакций – уретанообразования и азидо-алкинового циклоприсоединения.

Синтез высокоразветвленных полимеров осуществлен полиприсоединением мономеров, содержащих в своем составе одну этинильную группу (А) и две азидных (В) (мономеры типа АВ₂), а также смесей мономеров А₂ + В₄. Предложенный подход реализован с использованием промышленно производимых диизоцианатов – 1,6-гексаметилендиизоцианата и изофорондиизоцианата.

По результатам исследования кинетических закономерностей реакций уретанообразования (использовавшейся для синтеза мономеров) и азидо-алкинового циклоприсоединения (использовавшейся при полимеризации) сформулированы оптимальные условия получения высокоразветвленных поли(уретан-со-триазолов) без дополнительной очистки (one pot синтез).

Все полученные полимеры были охарактеризованы методами ИК-, ЯМР-спектроскопии и ЭЖХ.

УДК 535.372, 535.374, 546.57

ПЛАЗМОННОЕ УСИЛЕНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ АНИЗОМЕТРИЧНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ЛАНТАНОИДОВ¹

Карякин М.Е., Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г.

Казанский национальный исследовательский технологический университет
420015, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68
e-mail: belgesto@list.ru

В последнее время одним из перспективных путей увеличения эффективности люминесценции лантаноидов является использование поверхностных плазмонов наноструктур благородных металлов. Однако, из-за специфического характера поверхностного плазмона, металлические наноструктуры, на расстояниях от 1 до 10 нм, могут уменьшать люминесценцию хромофора. Поэтому для отделения хромофора от наноструктур используют спейсеры. Однако, наличие диэлектрического слоя (спейсера) между хромофором и металлическими

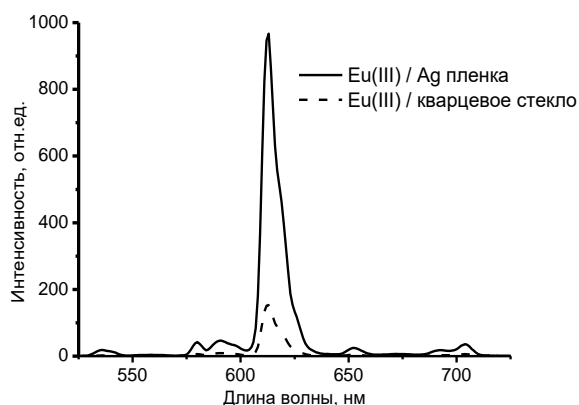


Рис. 1. Спектры люминесценции $\text{Eu}(\text{CPDk}_{3-\text{Ph}})_3\text{Phen}$

наноструктурами препятствует созданию электролюминесцентных устройств с люминесценцией, усиленной поверхностным плазмоном. Наноструктуры серебра с эффективным плазмонным резонансом были получены путем восстановления оксида серебра (I) D-глюкозой на поверхности кварцевого стекла. Полученный образец имел широкий пик поглощения с максимумом в области 420 нм. Методом напыления при вращении на полученные наноструктуры были нанесена тонкая пленка комплекса $\text{Eu}(\text{CPDk}_{3-\text{Ph}})_3\text{Phen}$ без использования дополнительных слоев спейсеров. Обнаружено увеличение интенсивности люминесценции в 6 раз и скорости излучательного перехода в 17 раз поверхностным плазмоном.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 16-03-00443

УДК 541.18.042.2:678.745

ОРГАНИЧЕСКИЕ ГИБРИДНЫЕ МАТЕРИАЛЫ КАК ЭФФЕКТИВНЫЕ ФЛОКУЛИРУЮЩИЕ АГЕНТЫ¹

Кашина Е.С., Проскурина В.Е., Галяметдинов Ю.Г.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет
420015, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68
e-mail: shabrova.93@mail.ru*

Разработка новых продуктов на основе полимеров природного происхождения – не только перспективный способ ликвидации недостатков синтетических полимеров, но и путь более рационального использования возобновляемых биоресурсов и переработки биоотходов. В настоящей работе оценена эффективность флокулянтов нового поколения – органических гибридных материалов на основе природных полисахаридов и катионного сополимера акриламида на модельной дисперсной системе (ДС) – суспензии $Mg(OH)_2$ со средним размером частиц $D_F \bar{R} = 27$ мкм, $\xi = -9$ мВ и с плотностью $\rho = 1.89 \cdot 10^3$ кг/м³ в водной и водно-солевой (NaCl) средах. Флокулянтами служили статистический сополимер акриламида с гидрохлоридом диметиламиноэтилметакрилата ($M = 3.8 \cdot 10^6$ и $\beta = 4$ мол.%), крахмал ($M = 0.021 \cdot 10^6$ и $\beta = 20$ мол.%) и пектин ($M = 0.04 \cdot 10^6$ и $\beta = 10$ мол.%). С ростом концентрации гибридного образца отмечено ускорение процесса седиментации частиц $Mg(OH)_2$ как в водной, так и в водно-солевой (NaCl) средах. Природная составляющая гибридного композита, обладающая склонностью к самоорганизации в разбавленных растворах, обеспечивает возможность связывания компонентов ДС неорганической и органической природы и формирование устойчивых агрегатов-флокулов при низких концентрациях. Полученные в ходе выполнения работы закономерности флокуляции позволяют прогнозировать эффективность и направленность процессов седиментации в многокомпонентных ДС, включая такие перспективные реагенты как органические гибриды.

Литература

1. Проскурина В.Е., Шаброва Е.С., Рахматуллина А.П., Галяметдинов Ю.Г. Синтез модифицированного пектина и его флокулирующие свойства. Журнал прикладной химии, 2017. Т. 90. №. 10. С. 1378-1384.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 18-03-00099

УДК 541.182.213:621.928.95

МАССОПЕРЕНОС В МОДЕЛЬНОМ СЛОЕ ВОЛОКОН, ПОКРЫТЫХ ПОРИСТЫМИ ПРОНИЦАЕМЫМИ ОБЛОЧКАМИ¹**Кирш В.А.^{а,б}, Кирш А.А.^б, Веселая М.И.^б, Шахов М.Н.^б**^а*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4*^б*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
123182, г. Москва, пл. Ак. Курчатова, д. 1
e-mail: va_kirsch@mail.ru*

Получила дальнейшее развитие работа в области интенсификации процесса улавливания взвешенных в потоке частиц путем создания фильтров из модифицированных волокон, покрытых пористыми оболочками (слоями) из наночастиц или нановискеров. Такие волокна обеспечивают максимальную эффективность улавливания частиц при наименьшем сопротивлении потоку. Численно исследовано осаждение точечных наночастиц в монослойных и многослойных модельных фильтрующих мембранах с упорядоченным расположением параллельных волокон. Решена задача о конвективно-диффузионном транспорте частиц в модельной системе волокон с пористыми проницаемыми оболочками (слоями) при течении двумерного стационарного потока вязкой несжимаемой жидкости. Совместным решением уравнений Стокса и Бринкмана, описывающих течение вне и внутри пористой оболочки, и уравнения конвективной диффузии, найдены поля течения и концентрации. Получены зависимости силы сопротивления волокна и коэффициента захвата точечных частиц волокном от радиуса, проницаемости и формы пористой оболочки, плотности упаковки волокон и числа Пекле. Решение впервые получено с учетом возможного неполного поглощения частиц, входящих с потоком внутрь пористой оболочки, в зависимости от параметров оболочки. Найдены оптимальные радиусы пористых оболочек, соответствующие максимуму критерия качества мембраны.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-03-00610а

УДК 541.182.213:621.928.95

ДИФФУЗИОННЫЙ МАССОПЕРЕНОС В МЕМБРАНАХ С ГРАНУЛЬНОЙ СТРУКТУРОЙ¹

Кирш В.А., Сенчихин И.Н., Шабатин А.В., Высоцкий В.В.

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4
e-mail: va_kirsch@mail.ru*

Проведено численное 3D моделирование поля течения и конвективно-диффузионного осаждения аэрозольных наночастиц из стокового потока (при малых числах Рейнольдса $Re \ll 1$) в модельных мембранах, состоящих из сплошных и пористых проницаемых гранул, включая гранулы, состоящие из наночастиц, образованных из наночастиц. Исследована эффективность осаждения точечных частиц в мембранах из сплошных гранул, с различной структурой и разной плотностью упаковки в зависимости от диффузионного числа Пекле, Pe . Показано, что в широком диапазоне чисел Пекле при $Pe > 10$ коэффициент захвата частиц гранулами пропорционален $Pe^{-2/3}$, причем в случае плотных модельных мембран, состоящих из слоев с квадратной и гексагональной структурой, коэффициент захвата не зависит от плотности упаковки. Для модельных мембран из сплошных гранул рассмотрено влияние инерционности потока на сопротивление потоку и массоперенос при $Re > 1$. Рассчитаны коэффициенты захвата частиц гранулами, и показано, что с ростом Re диффузионное осаждение частиц возрастает, причем тем более резко, чем больше значение Pe . Для сравнения приводятся результаты расчетов полей течения и эффективности массопереноса в модельных мембранах, состоящих из слоев полностью пористых и композитных гранул (с твердым ядром, покрытых пористой оболочкой). Проведено сравнение т.н. критериев качества рассмотренных фильтрующих мембран. Для описания течения внутри пористых проницаемых гранул и оболочек была использована модель Стокса-Бринкмана [1]. Приводятся примеры расчета перепада давления в слое. Из полученных результатов следует, что создание мембран на основе пористых проницаемых гранул является перспективным направлением для целей интенсификации процессов массопереноса.

Литература

1. Кирш В.А. Теоретические основы химической технологии, 2017. Т. 51. № 5. С. 532-537.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 16-08-01126 а

УДК 539.143.4

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ДИАГРАММЫ В АУРИПИГМЕНТЕ As_2S_3

Китанин Д.С., Мухлина Е.С., Николаев К.В., Погорельцев А.И., Матухин В.Л.,
Шмидт Е.В.

*Казанский государственный энергетический университет
420066, г. Казань, ул. Красносельская, д. 51
e-mail: zak7235@mail.ru*

Спектр ЯКР $75As$ измеренный ранее при температурах 77 и 300 К состоял из двух резонансных линий, частоты которых равны 70.336, 69.537 и 72.804, 71.942 МГц для температур 77 и 300 К соответственно. Нами была выполнена серия расчетов в рамках теории функционала плотности (DFT) с использованием различных обменных, корреляционных и гибридных функционалов. Было найдено хорошее соответствие экспериментальным данным: кластер AsI $As_{16}S_{25}n$ – $T = 300K$, = 69.54 МГц, $n = 1$, базис sto(3), функционал BHHLYP; $T = 77 K = 70.3358$ МГц, $n = 4$, базис sto(3), функционал BHHLYP; кластер AsII $As_{19}S_{28}n$ – $T = 300 K$, = 71.95 МГц, $n = 0$, базис sto(4), функционал B3LYP1,5; $T = 77 K$, = 72.81 МГц, $n = 12$, базис sto(4), функционал B3LYP1,5.

В настоящей работе основное внимание было уделено анализу энергетических диаграмм исследуемых кластеров. В частности, анализ величины щели LUMO-НОМО приводит к следующим результатам: кластер AsI $As_{16}S_{25}n$ – $T = 300 K$, $\Delta = 0.3265 eV$; $T = 77 K$, $\Delta = 0.9496848 eV$; кластер AsII $As_{19}S_{28}n$ – $T = 300 K$, $\Delta = 0.043538 eV$; $T = 77 K$, $\Delta = 0.01088 eV$. Обращает на себя внимание, в частности, тот факт, что величины щелей очень маленькие. Более того, характер изменения величин щелей с температурой различен для двух исследуемых неэквивалентных положений AsI и AsII – если в первом случае наблюдается уменьшение щели с повышением температуры, что типично для полупроводника, то во втором случае величина щели несколько растет, что характерно для металлов. На наш взгляд наблюдаемые особенности могут быть связаны с аномальной зависимостью интенсивности ЯКР.

УДК 541.64

ВЛИЯНИЕ СОДЕРЖАНИЯ СОПОЛИМЕРА Н-БУТИЛАКРИЛАТА И СТИРОЛА НА ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТНОГО СТЕКЛА¹

Комендант Р.И., Перепелицина Е.О., Бубнова М.Л., Образцова Н.А.,
Курочкин С.А.

*Институт проблем химической физики РАН
142432, г. Черноголовка, пр. Ак. Семенова, д. 1
e-mail: komendant@icp.ac.ru*

Одним из перспективных способов получения новых материалов с заданными свойствами является модифицирование существующих крупнотоннажных полимеров различными модификаторами. Модифицирование стеклообразных полимеров путем введения эластомерных добавок позволяет увеличивать их ударную прочность.

Методом «живой» радикальной полимеризации по механизму обратимой передачи цепи синтезированы и охарактеризованы комплексом физико-химических методов два сополимера н-бутилакрилата и стирола с молекулярной массой, отличающейся в ~ 3 раза, и исследовано влияние их содержания в полиметилметакрилате на его деформационно-прочностные свойства.

Показано, что присутствие модификаторов приводит к уменьшению модуля упругости не более чем на 20%, в то время как работа разрушения увеличивается на 75-150% в зависимости от молекулярной массы сополимера и имеет максимальное значение при содержании модификаторов 1-3 мас. %.

Установлено, что полиметилметакрилаты, модифицированные добавками сополимеров н-бутилакрилата и стирола, имеют высокие температуры стеклования, поэтому теплостойкость модифицированных оргстеклол остается на прежнем уровне. Светопроницаемость оргстеклол, модифицированных линейными сополимерами, остается приемлемой для прозрачных изделий только при содержании модификаторов, не превышающем 3 мас. %.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Программы Президиума РАН «Наноструктуры»

УДК 550.8.08: 681.2-2: 539.3: 539.3/.6: 004.942

ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ ПОЛИМЕРНОГО ПОДВЕСА ЧУВСТВИТЕЛЬНОГО ЭЛЕМЕНТА МАГНИТОМЕТРИЧЕСКОГО ПРИБОРА¹

Коробейников А.Г.^{а,б}, Перечесова А.Д.^а, Калапышина И.И.^а, Гатчин Ю.А.^б, Федосовский М.Е.^б, Поляков В.И.^б

^аСанкт-Петербургский филиал Института земного магнетизма, ионосферы и распространения радиоволн им. Н.В. Пушкова РАН
199034, г. Санкт-Петербург, Университетская наб, д. 5, лит. Б.

^бУниверситет ИТМО
197101, г. Санкт-Петербург, Кронверкский проспект, д. 49
e-mail: office@izmiran.spb.ru, od@mail.ifmo.ru

В СПбФ ИЗМИРАН разработан высокотехнологичный геофизический комплекс серии GI-MTS. Ответственную роль в комплексе играет упругий элемент – упругий торсионный подвес магниточувствительного элемента магнитостатического вариометра. Торсион изготавливают из полимерного материала: трех микрофиламентов арамидных нитей диаметром 0,016 мм. Для усовершенствования прибора, повышения точности, необходимым является исследование физико-механических характеристик упругого элемента.

Цель работы – спроектировать расчетные модели в среде ANSYS WorkBench, получить и проанализировать результат для торсионов с плотностью плетения 7 узлов/мм, 15 узлов/мм, 20 узлов/мм. выбрать оптимальные характеристики торсионного подвеса для системы комплекса серии GI-MTS.

Ранее была разработана методика, позволяющая значительно сократить эффект внутреннего проскальзывания филамента в зажиме, что повышает точность и стабильность экспериментальных исследований на растяжение нитевидных образцов с микронными толщинами. были получены параметры необходимые для расчетов на ANSYS WorkBench. Как известно из теории упругости, физико-механические характеристики зависят от структуры образцов. Исследуемый торсионный подвес может быть изготовлен с разной плотностью плетения. для определения оптимальных характеристик плетеных микрофиламентных арамидных торсионов целесообразно применять современные методы аналитического исследования, реализованные в пакете ANSYS WorkBench.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 17-07-00700

В работе созданы расчетные модели для среды ANSYS WorkBench, получены результаты для торсиона с плотностью плетения 7 узлов/мм, которые подтверждены экспериментальными данными, приведены результаты расчетов для торсиона плотностью плетения 7 узлов/мм, 15 узлов/мм, 20 узлов/мм, сделан вывод.

УДК 691.175

НОВЫЕ ЭПОКСИАМИННЫЕ МАТЕРИАЛЫ, МОДИФИЦИРОВАННЫЕ ФРАГМЕНТАМИ ОЛИГОГЕКСАМЕТИЛЕНГУАНИДИНА¹

Косакович Е.О.^а, Жаворонок Е.С.^а, Седишев И.П.^а, Сафонов А.В.^б,
Сенчихин И.Н.^б

*^аМосковский технологический университет
119571, г. Москва, пр. Вернадского, д. 86;*

*^бИнститут физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4
e-mail: elizaweta.cosakovi4@yandex.ru*

Эпоксидные материалы широко распространены в различных областях. Простым способом улучшения их свойств является модификация различными добавками, среди которых большой интерес вызывают реакционноспособные модификаторы. Такими модификаторами для эпоксидных систем могут быть олигогексаметиленгуанидины (ОГМГ), проявляющие выраженное биоцидное действие в отношении многих болезнетворных микроорганизмов. Однако гидрофильность ОГМГ препятствует их включению в эпоксидные сетки в достаточном объеме и равномерному распределению в материале. Поэтому целью работы была гидрофобизация ОГМГ и включение его в эпоксиаминные сетки для создания пленок с повышенной биоцидной активностью.

Нами предложен новый способ введения ОГМГ в сравнительно гидрофобные эпоксиаминные сетки за счет использования специально синтезированных солей с органическими кислотами: стеариновой, пальмитиновой и салициловой. Результаты ДСК показали, что эти соли лучше растворимы в низкомолекулярных диановых алифатических ЭО, чем исходный ОГМГ-гидрохлорид. За счет этого химическое взаимодействие между ОГМГ и ЭО более выражено, что позволяет создавать на их основе аддукты-модификаторы. Предварительные исследования биоцидной активности с использованием МТТ-теста показали повышенную биоцидную активность пленок с модифицированными ОГМГ.

¹ Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 18-08-01252А

УДК 541

СОРБЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ИОНООБМЕННОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ ПО ДАННЫМ ЯМР-РЕЛАКСАЦИИ

Красильникова С.В., Грунин Ю.Б.

*Поволжский государственный технологический университет
424000, г. Йошкар-Ола, пл. Ленина, д. 3
e-mail: KrasilnikovaSV@volgatech.net*

В процессе технологической обработки целлюлозных волокон растворами разнообразных солей происходит изменение надмолекулярной структуры и физико-химических свойств полимера. Данная работа посвящена анализу взаимодействия ионообменной целлюлозы с водой в ходе изотермического сорбционного процесса с использованием высокоинформативного метода ЯМР ^1H релаксации.

Объектом исследования явились образцы древесной сульфатной целлюлозы (ГОСТ 9571-89 и ГОСТ 28172-89). Катионные формы образцов готовились обработкой обеззоленной целлюлозы растворами CuCl_2 и MnCl_2 различных концентраций с последующим тщательным промыванием и высушиванием до постоянной массы. Для снятия изотерм сорбции воды целлюлозой использовался метод изопиестических серий. ЯМР измерения выполнялись на импульсном релаксметре с рабочей частотой 42 МГц.

Сравнительный анализ изотерм сорбции паров воды целлюлозными волокнами и зависимостей времён спин-решёточной и спин-спиновой релаксации от влагосодержания в образцах биополимера указывает на различия в процессах, протекающих на разных стадиях увлажнения обеззоленной и ионообменной целлюлоз. Методом ЯМР обнаружено существование двух фаз адсорбированной воды в пределах «монослоя» в катионных формах образцов полисахарида, которые могут образовывать молекулы воды, связанные с гидроксильными группами природного полимера и совокупность молекул, находящихся в координационной сфере иона.

УДК 541.64:678.745.6:544.6.018.462.42:52-334.2

СИНТЕЗ, МЕХАНИЧЕСКИЕ И ПРОТОН-ПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА ПОЛИАМИДОВ И ПОЛИИМИДОВ С БОКОВЫМИ SO₃H-ГРУППАМИ

Краснопеева Е.Л.^{а,б}, Подешво И.В.^а, Гойхман М.Я.^а, Гофман И.В.^а,
Иванова А.Г.^б, Загребельный О.А.^б, Шилова О.А.^б, Якиманский А.В.^а

^аИнститут высокомолекулярных соединений РАН
199004, г. Санкт-Петербург, В.О. Большой проспект, д. 31

^бИнститут химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН,
199034, г. Санкт-Петербург, наб. Макарова, д. 2
e-mail: oreeva@gmail.com

С помощью низкотемпературной поликонденсации дихлорангидрида терефталойл-бис(3-метокси-4-гидрокси)бензойной кислоты со смесью 2,2'-бензидин-дисульфоновой кислоты (от 10 до 50 мол.%) и 4,4'-диаминодифенилового эфира (от 90 до 50 мол.%) в N-метил-2-пирролидоне синтезированы новые сополиамиды с боковыми сульфокислотными группами. Механические испытания пленок сополиамидов показали значительный рост модуля упругости с увеличением содержания звеньев 2,2'-бензидин-дисульфоновой кислоты. Наибольшее значение протонной проводимости ($6 \cdot 10^{-5}$ см/см) получено для сополиамида с 10 мол.% 2,2'-бензидин-дисульфоновой кислоты, что, возможно, связано с понижением подвижности полимерных цепей с возрастанием числа межмакромолекулярных водородных связей при более высоком содержании сульфокислотных групп.

Также синтезированы новые полиимиды, содержащие сульфокислотные группы, на основе 2,2'-бензидин-дисульфоновой кислоты и (2,2-гексафторизопропилиден)дифталевого диангидрида или диангидрида 3,3',4,4'-(1,3-дифеноксibenзол)-тетракарбоновой кислоты. На основе синтезированных полиимидов получены прочные самонесущие пленки, потенциально перспективные в качестве полимерных протон-проводящих мембран.

УДК 54.057, 535.37, 544.25

ФОТОСТАБИЛЬНОСТЬ ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ ПММА, ДОПИРОВАННОГО МЕЗОГЕННЫМ КОМПЛЕКСОМ ЕВРОПИЯ¹

Крупин А.С., Новгородова В.Д., Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г.

Казанский национальный исследовательский технологический университет
420015, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68
e-mail: krupin_91@mail.ru

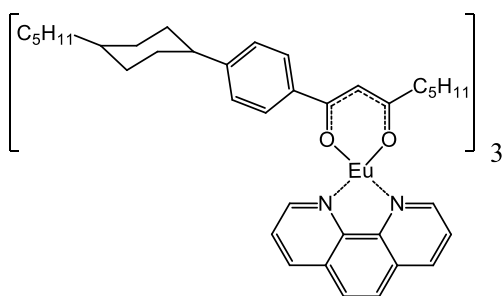


Рис. 1. Структура комплекса европия (III)

Внедрение комплексов лантаноидов в полимеры позволяет получать разнообразные оптические материалы, придавая им желаемую форму и размер. Такие материалы в настоящее время широко востребованы в качестве конвертеров света и используются в устройствах молекулярной электроники.

Однако, как известно, ограничением многих доступных полимеров, в том числе и ПММА, является их фотодеструкция под действием длительного УФ облучения. Поэтому, целью данной работы явилось изучение фотостабильности пленок ПММА, допированных новым мезогенным комплексом европия (рис. 1), способным эффективно поглощать и конвертировать УФ излучение.

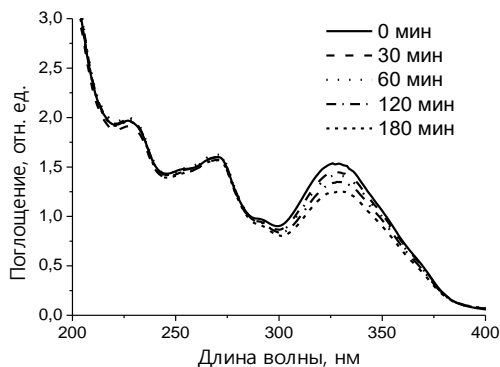


Рис. 2. Зависимость поглощения пленок ПММА, допированного 20% комплекса Eu(III) от времени облучения УФ светом (254 нм)

Показано, что введение комплекса лантаноида в ПММА позволяет уменьшить фотодеструкцию пленки, о чем свидетельствуют спектры поглощения (рис. 2). Полученный фотостабильный материал эффективно преобразует УФ излучение в красный свет с максимумом на длине волны 613 нм.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда, проект № 17-03-00258

УДК 544.773.4

СТРУКТУРНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ ЧАСТИЦ МОНТМОРИЛЛОНИТА В СИЛИКОНОВОМ МАСЛЕ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ¹

Кузнецов Н.М.^а, Бакиров А.В.^{а,б}, Столярова Д.Ю.^{а,б}, Петерс Г.С.^а, Соколов М.А.^а,
Белоусов С.И.^а, Чвалун С.Н.^{а,б}

^а*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
123182, г. Москва, пл. Ак. Курчатова, д. 1*

^б*Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН
117393, Москва, ул. Профсоюзная, д. 70
e-mail: serbell@gmail.com*

Электрореологический эффект известен с 40-х годов XX века, и заключается в быстром и обратимом изменении реологических свойств суспензий полупроводниковых частиц в непроводящей жидкости под действием электрического поля. Механизм эффекта связывают с образованием колончатых структур из поляризованных частиц дисперсной фазы под действием электрического поля. Образование таких структур хорошо описано в литературе и широко исследовано методом оптической микроскопии, однако структура отдельной колонны, что имеет решающее значение для величины электрореологического эффекта в случае сильно анизометричных наполнителей, практически не изучена. На примере электрореологических жидкостей на основе полидиметилсилоксана, наполненного монтмориллоном, методом рассеяния синхротронного рентгеновского излучения в работе изучены принципы структурообразования частиц дисперсной фазы на уровне отдельной частицы. В зависимости от типа используемого монтмориллонита наблюдается образование различно упакованных структур. Предложено теоретическое обоснование, а также проведена численная оценка наблюдаемых процессов упорядочения частиц монтмориллонита в суспензии под действием электрического поля.

¹ Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, грант № 18-03-00078 А

УДК 544.773.4

**ЭЛЕКТРОРЕОЛОГИЧЕСКИЕ ЖИДКОСТИ. ЭФФЕКТ ФОРМЫ
НАПОЛНИТЕЛЯ¹**

Кузнецов Н.М.^а, Соколов М.А.^а, Белоусов С.И.^б, Чвалун С.Н.^{а,б},
Столярова Д.Ю.^{а,б}

*^аНациональный исследовательский центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, пл. Ак. Курчатова, д. 1*

*^бИнститут синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН
117393, Москва, ул. Профсоюзная, д. 70
e-mail: serbell@gmail.com*

Электрореологические жидкости – класс умных материалов, дисперсные системы, состоящие из полупроводниковых микро- или наночастиц в среде с низкой диэлектрической проницаемостью. Такие системы способны изменять свои реологические свойства при наложении электрического поля, за счет образования протяженных колончатых структур дисперсной фазы вдоль силовых линий электрического поля. На величину электрореологического эффекта существенное влияние оказывают разница в диэлектрических характеристиках наполнителя и среды, седиментационная устойчивость суспензий, а также форма частиц наполнителя. При использовании сильно анизометричных частиц наблюдается существенный эффект при наполнении системы (менее 10 об.%). Природные наноглины, относящиеся к классу алюмосиликатов обладают большим характеристическим отношением и являются перспективными наполнителями для электрореологических жидкостей. В работе рассмотрены электрореологические и диэлектрические характеристики суспензий, наполненных частицами различной формы – пластинчатой (монтмориллонит) и трубчатой (галлуазит). Проведен сравнительный анализ влияния формы частиц наполнителя на электрореологическое поведение жидкостей. Показана связь наблюдаемых эффектов со структурой наполнителя.

¹ Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, грант № 18-03-00078 А

УДК539.143.43:5 39.199

МЕТОД ИМПУЛЬСНОГО ЯМР ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРЫ И ПОДВИЖНОСТИ ПОЛИМЕРНЫХ ЦЕПЕЙ В СШИТЫХ И РАЗВЕТВЛЕННЫХ ПОЛИМЕРАХ¹

Кулагина Т.П., Карнаух Г.Е.

*Институт проблем химической физики РАН
142432, г. Черноголовка, пр. Ак. Семенова, д. 1
e-mail: tan@icp.ac.ru*

На основе развитой ранее теории спектров ЯМР в линейных и сшитых полимерах разработаны методы определения топологической структуры, долей концевых цепей и цепей, соединенных физическими или химическими узлами, по спадам свободной индукции (ССИ) и форме линии. Предложен общий подход для вычисления сигналов спиновых эхо и диффузионного затухания. Показано, что при большом времени диффузии в сшитых полимерах коэффициент самодиффузии логарифмически зависит от средней длины цепи.

Развиты методы определения корреляционной функции молекулярной подвижности полимерных цепей непосредственно из ЯМР экспериментов на основе теории сигналов спада свободной индукции (ССИ) и стимулированного эха (СЭ). Из совпадения теоретических и экспериментальных сигналов ССИ и формы линии для линейных и разветвленных поли(мет)акрилатов при 130°C определены плотность и топологическая структура эффективной полимерной сетки, характерные времена корреляции сегментального движения цепей. Из сравнения теории и эксперимента определены корреляционные функции молекулярной подвижности в разветвленных полиметилметакрилатах.

¹ Работа выполнена в рамках Госзадания ФАНО, № 0089-2014-0021

УДК 541.64:539.199.532.5

ГИДРОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ РАЗВЕТВЛЕННЫХ ПОЛИСТИРОЛОВ С РАЗНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ ВЫСОКОРАЗВЕТВЛЕННОЙ ФРАКЦИИ¹

Курочкин С.А., Махонина Л.И., Васильев С.Г., Перепелицина Е.О.,
Бубнова М.Л., Волков В.И., Грачев В.П.

*Институт проблем химической физики РАН
142432, г. Черноголовка, пр. Ак. Семенова, д. 1
e-mail: oligo@icp.ac.ru*

Высокоразветвленные полимеры – это класс полимеров, которые по топологии макромолекулярной цепи занимают промежуточное положение между линейными полимерами наряду со слаборазветвленными, имеющими единичные ответвления полимерной цепи, и сетчатыми полимерами с формально бесконечным количеством точек ветвления.

В настоящей работе методом радикальной сополимеризации стирола и дивинилбензола с обратимым ингибированием 2,2,6,6-тетраметилпиперидин-1-оксидом синтезированы разветвленные полимеры с разным содержанием высококоразветвленной фракции. Разветвленные полистиролы исследованы методами эксклюзионной хроматографии в сочетании со статическим светорассеянием, вискозиметрии, ядерного магнитного резонанса с импульсным градиентом магнитного поля, озонлиза. Разветвленные полимеры, полученные методом «живой» радикальной полимеризации, характеризуются пониженными величинами характеристической вязкости и повышенными величинами коэффициентов самодиффузии по сравнению с линейными аналогами. С увеличением содержания высококоразветвленной фракции в синтезированных полимерах вязкостный фактор Зимма в растворе толуола уменьшается до ≈ 0.13 . Параметры уравнения Марка-Куна-Хаувинка для этих полимеров в растворе толуола ($a = 0.43$) и тетрагидрофурана ($a = 0.29$) подтверждают нелинейную архитектуру макромолекул.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Программы Президиума РАН «Наноструктуры»

УДК 678.7

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА СМЕСЕЙ ПОЛИМЕРОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИПРОПИЛЕНА И ПОЛИСТИРОЛА¹

Малахов С.Н., Демина В.А., Чвалун С.Н.

*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
123182, г. Москва, пл. Ак. Курчатова, д. 1
e-mail: s.malakhov@mail.ru*

Использование многокомпонентных полимерных систем является эффективным способом получения изделий с улучшенным комплексом характеристик. Из смесевых композиций возможно получать материалы, обладающие как свойствами исходных полимеров, так и специфическими свойствами, в т.ч. возникающими за счет химических взаимодействий компонентов смеси. Кроме того, за счет селективной экстракции одного из компонентов смеси возможно получение материалов с высокоразвитой поверхностью. При этом расплавные методы получения являются более технологичными, т.к. в этом случае отсутствует необходимость подбора растворителей, подходящих для всех компонентов смеси.

В данной работе получены и охарактеризованы полимерные смеси на основе изотактического пропилена и полистирола, в т.ч. с добавлением стеарата натрия, позволяющего регулировать реологические и электрофизические свойства расплавов [1]. Вязкость расплавов исследована методом капиллярной вискозиметрии, электропроводность – методом диэлектрической спектроскопии. Структура образцов исследована с использованием рентгеноструктурного анализа и ИК-спектроскопии. Кроме того, изучена смачиваемость полученных материалов.

Литература

1. Малахов С.Н., Белоусов С.И., Орехов А.С., Чвалун С.Н. Химические волокна, 2018. № 1. С. 29-34.

¹ Работа выполнена при поддержке Гранта Президента РФ для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук, грант МК-3783.2018.3

УДК 544.72.023.223

**СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЕ ПОЛИАНИЛИНА И ТЕТРААНИЛИНА
НА ПОВЕРХНОСТИ ВОДЫ И ТВЕРДЫХ ПОДЛОЖЕК¹**

Малахова Ю.Н.^{а,б}, Щербань В.В.^{а,б}, Дьякова Е.Д.^{б,в}, Коровин А.Н.^а,
Ягудаева Е.Ю.^{б,в}, Чвалун С.Н.^{а,б}

^аНациональный исследовательский центр «Курчатовский институт»
123182, г. Москва, пл. Ак. Курчатова, д. 1

^бИнститут тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова,
Московский технологический университет
119571, г. Москва, пр. Вернадского, д. 86

^вИнститут биоорганической химии им Ак. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН
117997, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 16/10
e-mail: j.malakhova@mail.ru

В органической электронике перспективно использовать полимерные и олигомерные материалы, обладающие полупроводниковыми свойствами. В данной работе проведен сравнительный анализ поведения поли- и тетраанилина в растворах, ленгмюровских слоях и тонких пленках на твердых подложках. Поскольку электропроводностью обладают соли окисленной формы полимера и олигомера (эмеральдиновые соли), особое внимание было уделено установлению влияния способа и условий протонирования эмеральдинового основания на проводимость тонкопленочных материалов.

Протонирование полианилина или тетраанилина соляной или камфорсульфоновой кислотами проводили либо в растворе, либо в ленгмюровском слое, либо в тонких пленках, перенесенных методом Ленгмюра-Шефера. Были определены оптимальные условия получения электропроводящих тонких пленок и оценены перспективы их использования в органической электронике для создания мемристивных элементов.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ МК-2757.2017.3 и РФФИ, проект № 15-29-01324. Работа частично выполнена на оборудовании Ресурсных центров НИЦ «Курчатовский институт»

УДК 544.77.051

МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЯ В ЦИСТЕИН-СЕРЕБРЯНОМ РАСТВОРЕ¹

Малышев М.Д., Бабуркин П.О., Хижняк С.Д., Пахомов П.М.

*Тверской государственный университет
170002, г. Тверь, Садовый переулок, д. 35
e-mail: bggf@bk.ru*

Отличительная способность супрамолекулярных гидрогелей на основе цистеин-серебряного раствора (ЦСР) – способность к гелеобразованию при очень низкой концентрации реагентов $\sim 0.01\%$ за счет обратимых межмолекулярных связей после введения различных солей металлов. В докладе обсуждается построение модели созревания цистеин-серебряного раствора (ЦСР). Для реализации модели мы используем метод атомистической молекулярной динамики (МД). С помощью созданной модели было выполнено изучение кинетики формирования кластеров меркаптида серебра (МС) из компонентов раствора и их физико-химических свойств. Анализ результатов расчетов позволил лучше понять, почему ЦСР обладает способностью к самоорганизации на больших масштабных уровнях. Дополнительно, в рамках метода функционала электронной плотности было изучено взаимодействие цвиттер-ионов МС друг с другом и различными ионами, содержащимися в растворе. Эти расчеты позволили подтвердить корректность МД моделирования. Полученные результаты полезны для понимания механизма самоорганизации супрамолекулярных систем на основе серосодержащих аминокислот, реализации управляемой самосборки наноразмерных частиц и позволяют сформулировать рекомендации для синтеза новых низкомолекулярных загустителей. В целом результаты подтверждают, что гель-сетка в ЦСР образуется за счет формирования водородных связей между NH_3^+ и $\text{C}(\text{O})\text{O}^-$ группами на поверхности агрегатов.

¹ Работа выполнена в рамках НИР по заданию Минобрнауки России на 2017-2019, № 4.2246.217/ПЧ. Авторы так же выражают благодарность фонду РФФИ за финансовую поддержку, проект № 18-33-00146, и МСЦ РАН за предоставление вычислительных ресурсов кластера МВС-100k

УДК 539.2

ВЛИЯНИЕ ВОССТАНАВЛИВАЮЩЕГО АГЕНТА ТСЕР НА ПРОЦЕССЫ ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЯ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ БЕЛКА АЛЬФА-КАЗЕИНА

Мельникова Д.Л., Скирда В.Д.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,
420111, г. Казань, ул. Кремлевская 16а, Институт физики
e-mail: melndaria@gmail.com*

Определение структурной организации, а также выяснение механизмов внутри- и межмолекулярных взаимодействий белковых молекул имеют значение для понимания огромного разнообразия функций белков, выполняемых ими в живых организмах. Существенную [1,2] роль в организации различных надмолекулярных белковых структур играют межмолекулярные и внутримолекулярные связи, которые могут образовываться либо за счет ковалентных связей (например, дисульфидные связи, образующимися между -SH- группами остатков цистеина), либо благодаря нековалентным взаимодействиям.

Цель нашей работы состояла в изучении особенностей трансляционной подвижности внутренне неупорядоченного белка альфа-казеина в водных растворах при добавлении восстанавливающего агента Трис (2-карбоксиэтил) фосфин гидрохлорид методом ЯМР с импульсным градиентом магнитного поля (ИГМП).

Работа выполнена на оборудовании ЦКП ФХИ КФУ спектрометре «AVANCE 400 III ТМ», оптимизированного для твердого тела, самодиффузии и микротомографии.

Литература

1. Barone J.R., Dangaran K., Schmidt W.F. Blends of cysteine-containing proteins. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2006. V.54. P. 5393-5399.
2. Kester J.J., Richardson T. Modification of whey proteins to improve functionality. Journal of Dairy Science, 1984. V.67. P. 2757-2774.

РЕАКЦИЯ ИМИДАЗО[4,5-е]БЕНЗО[1,2-с;3,4-с']ДИФУРОКСАНА С ЦИСТЕИНОМ

Меркулова Н.Л.^а, Даниленко В.М.^а, Королев В.Л.^{а,б}, Батуев Е.А.^в, Пивина Т.С.^а

^аИнститут органической химии им. Н.Д. Зелинского
119991, г. Москва, Ленинский пр., д. 47

^бКурский Государственный Университет
305000, г. Курск, ул. Радищева, д. 33

^вИнститут молекулярной биологии им. В.А.Энгельгардта РАН
119991, г. Москва, ул. Вавилова, д. 32
e-mail: fraumerk@gmail.com

В продолжение исследований свойств имидазо[4,5-е]бензо[1,2-с;3,4-с']дифуроксанов (ИБДФ) – эффективных доноров оксида азота (NO)¹ – изучена

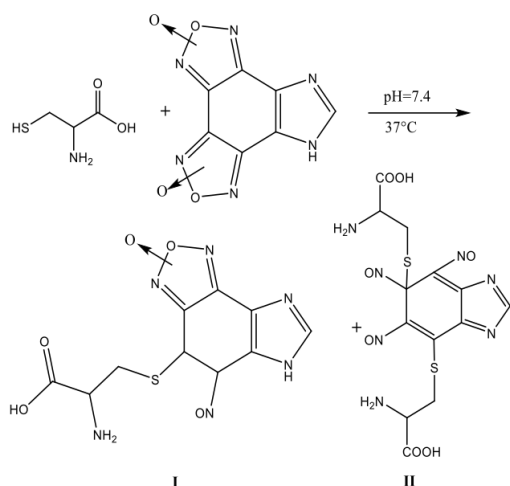


Рис. 1.

реакция незамещенного ИБДФ с цистеином (рис. 1). Показано, что в физиологических условиях (фосфатный буфер, pH = 7.4, t = 37°) при взаимодействии ИБДФ с пятикратным избытком тиола происходит раскрытие фуруксанового цикла с высвобождением NO и присоединением одного (I) или двух (II) цистеиновых остатков. Выделение оксида азота подтверждено фотометрическим методом с реактивом Грисса. Полноту протекания реакции контролировали методами хромато-масс-спектрометрии.

Продукты реакции были выделены с помощью препаративной ВЭЖХ и охарактеризованы методами ЯМР ¹H, ¹³C, ИК и масс-спектрометрии высокого разрешения. Установлено, что цистеин-замещенный имидазобензофуруксан (I) в водном растворе и диметилсульфоксиде (ДМСО) представляет собой смесь таутомеров. Изучена устойчивость цистеиновых производных (I, II) в воде и ДМСО.

Литература

1. Королев В.Л.; Топоров В.В.; Меркулова Н.Л.; Даниленко, В.М.; Ившин, В.П.; Пивина Т.С. Известия Академии наук. Серия химическая, 2017. 11. С. 2126-2130.

УДК 538.915

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ЗОЛОТЫХ НАНОТРУБОК, ЭНЕРГИИ ОПТИЧЕСКИХ ПЕРЕХОДОВ

Миронов Г.И.

Марийский государственный университет
424000, г. Йошкар-Ола, пл. Ленина, д. 1
e-mail: mirgi@marsu.ru

В [1] зонная структура (8,0) нанотрубки из атомов золота была рассчитана методом линеаризованных присоединенных плоских волн. Расчеты показали, что уровни энергии s -электронных состояний расположены полностью в пределах валентной зоны, s -электроны не принимают участие в электронном транспорте. Зона проводимости соответствует d -электронным состояниям, d -электроны вовлекаются в электронный транспорт. Целью данной работы является исследование в дополнение [1,2] золотой нанотрубки в рамках квантовой теории поля.

Для изучения квантовых систем, в которых определяющую роль играют d -электроны, была предложена модель Хаббарда [3], решение которой в работе осуществлено в рамках «приближения статических флуктуаций» [4].

В работе произведено вычисление Фурье-образа антикоммутирующей функции Грина, получен энергетический спектр золотой нанотрубки. Вычислена плотность электронных состояний золотой нанотрубки, пики которой соответствуют особенностям Ван-Хова [1]. Приведен спектр оптического поглощения для первого прямого перехода при оптическом поглощении в золотой нанотрубке. Вычислена энергия основного состояния нанотрубки, анализ которой позволяет понять, почему золотые наночастицы могут «прилипнуть» к раковым клеткам живого организма.

Литература

1. Dyachkov P.N. Russian Journal of Inorganic Chemistry, 2014. 59. 12. P. 1454-1461.
2. Mironov G.I. Russian Journal of Inorganic Chemistry, 2018. 63. 1. P. 66-68.
3. Hubbard J. Proceedings of the Royal Society, Series A, 1963. 276. 1365. P. 238-257.
4. Mironov G.I. Physics of the Solid State, 2006. 48. 7. P. 1378-1386.

УДК 538.22

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ЗОЛОТЫХ НАНОТРУБОК (8,0) В МОДЕЛИ ХАББАРДА

Миронов Г.И., Семенов А.Д.

*Марийский государственный университет
424000, г. Йошкар-Ола, пл. Ленина, д. 1
e-mail: richman-aleks@mail.ru*

Выраженный интерес к теоретическому исследованию нанотрубок, состоящих из атомов золота Au, вызван возможностью их применения в лечении раковых заболеваний, в качестве контактов между элементами молекулярной электроники, являющееся важным составляющим при конструировании электронных устройств и наноэлектронных схем [1].

Для возможности применения методов квантовой теории поля реальную золотую нанотрубку заменим теоретической моделью, которая могла бы объяснить большую часть физико-химических свойств золотых нанотрубок и предсказать новые свойства этих наночастиц золота. Для этого мы можем применить микроскопическую модель Хаббарда [2].

Решения получены в рамках приближения статических флуктуаций [3]. Мы подтвердили вывод, полученный в [4], что при небольшом количестве атомов одностенная золотая нанотрубка (SWGН) ведет себя как полупроводник. При большем количестве атомов, как показывает наше исследование, нанотрубка ведет себя как металл. Таким образом, при определенных значениях параметров рассматриваемой квантовой системы мы наблюдаем переход полупроводник – металл. Энергия ионизации уменьшается с ростом нанотрубки, а энергия сродства, наоборот, увеличивается. Вычислены энергия основного состояния, энергия ионизации и энергия сродства к электрону, был проведен сравнительный анализ наносистем. Вычислена и построена плотность электронных состояний.

Литература

1. Yarzhemsky V.G., Battocchio C. Russian Journal of Inorganic Chemistry, 2011. 56. 1. P. 947.
2. Hubbard J. Proceedings of the Royal Society, Series A, 1963. 276. 1365. P. 238.
3. Миронов Г.И., Филлипова Е.Р. Физика твердого тела, 2012. 54. С. 8.
4. Yang X.P., Dong J.M. Physical Review B, 2005. 71. P. 233403.

УДК 544

ДРАМАТИЧЕСКОЕ ВЛИЯНИЕ ПИЛЛАР[5]АРЕНОВОЙ ПЛАТФОРМЫ НА СТАБИЛЬНОСТЬ ПРОИЗВОДНЫХ ТРЕХВАЛЕНТНОГО ФОСФОРА¹

Назарова А.А., Махмутова Л.И., Стойков И.И.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет
420008, г. Казань, ул. Кремлевская, д. 18
e-mail: anas7tasia@gmail.com*

Дизайн синтетических макроциклических рецепторов на основе пиллараренов, каликсаренов, резорциаренов и циклодекстринов, способных распознавать субстраты различного типа и катализировать химические превращения, является одним из бурно развивающихся направлений современной супрамолекулярной химии. Введение различных фосфорорганических фрагментов в макроциклические структуры позволяет создавать новые типы супрамолекулярных и координационных систем с практически полезными свойствами.

В ходе проведенного исследования были получены новые монозамещенные пиллар[5]арены, содержащие гидрофосфорильные фрагменты. Было установлено, что образующийся при фосфорилировании P-O(Ar) фрагмент понижает свою реакционную способность вследствие экранирования макроциклической структурой пиллар[5]арена. Структура синтезированных производных была доказана комплексом физических методов: ЯМР ¹H, ³¹P, ¹³C, ИК- и масс-спектрометрией.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 17-13-01208, и стипендии Президента Российской Федерации для молодых ученых и аспирантов, осуществляющих перспективные научные исследования и разработки по приоритетным направлениям модернизации российской экономики, СП-66.2018.4. Изучение пространственной структуры соединений с помощью ЯМР спектроскопии финансировалось за счет субсидии Правительства России на поддержку Программы повышения конкурентоспособности Казанского федерального университета среди ведущих мировых научно-образовательных центров

УДК 544.478.1

ДИФОСФИНОВЫЕ КОМПЛЕКСЫ КОБАЛЬТА И НИКЕЛЯ КАК КАТАЛИЗАТОРЫ РЕАКЦИИ ВОССТАНОВЛЕНИЯ КИСЛОРОДА¹

Низамеев И.Р.^а, Низамеева Г.Р.^б, Стрельник И.Д.^а, Спиридонова Ю.С.^а,
Карасик А.А.^а, Кадиров М.К.^а

^аИнститут органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН
420088, г. Казань, ул. Ак. Арбузова, д. 8

^бКазанский национальный исследовательский технологический университет
420015, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68
e-mail: irek.rash@gmail.com

В настоящей работе изучается ряд дифосфиновых комплексов никеля и кобальта в роли катализатора реакции восстановления кислорода (РВК) (рис. 1).

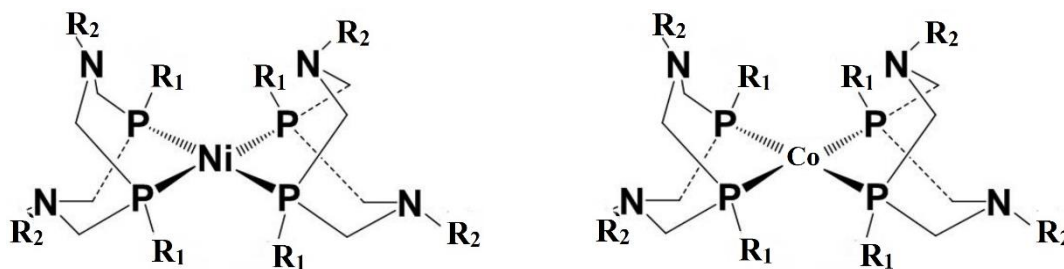


Рис. 1. Объекты исследования. R₁ и R₂ – заместители: Bn, Ph, Py, p-Tol

Для изучения кинетики реакции электровосстановления кислорода на вращающемся дисковом электроде использовали уравнение Коутецкого-Левича [1,2]. По наклону кривой Коутецкого-Левича определено количество электронов, участвующих в электрохимической реакции. Для изученных комплексов оно колеблется в диапазоне от 2.5 до 4. Это значит, что природа заместителя играет важную роль.

Литература

1. Jeon M.K., Zhang Y., McGinn J.P. A comparative study of PtCo, PtCr, and PtCoCr catalysts for oxygen electro-reduction reaction. *Electrochimica Acta*, 2010. V.55. P. 5318–5325.
2. Беленов С.В. Pt/C и Pt_xNi/C электрокатализаторы: синтез в водно-органических средах, морфология, активность: диссертация кандидата химических наук: 02.00.04. Ростов-на-Дону, 2013. 178 с.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, научный проект № 17-08-01454А

УДК 544.72.05

АГРЕГАЦИЯ ДИФОСФИНОВЫХ КОМПЛЕКСОВ КОБАЛЬТА НА ПОВЕРХНОСТИ СЛЮДЫ¹

Низамеева Г.Р.^а, Низамеев И.Р.^{а,б}, Стрельник И.Д.^б, Спиридонова Ю.С.^б, Карасик А.А.^б, Кадиров М.К.^{а,б}, Нефедьев Е.С.^а

^а*Казанский национальный исследовательский технологический университет
420015, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68*

^б*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН
420088, г. Казань, ул. Ак. Арбузова, д. 8
e-mail: guliya.riv@gmail.com*

В рамках данной работы изучается морфология дифосфиновых комплексов кобальта на поверхности слюды. В качестве объектов исследования в данной работе выступают дифосфиновые комплексы кобальта с различными заместителями. В качестве заместителей выступают фенил-фенил (Co-PhPh), фенил-бензил (Co-PhBn), фенил-фенил-фенил (Co-PhPhPh). Морфология агрегатов комплексов изучалась методом атомно-силовой микроскопии (АСМ). Исследования показали, что для комплекса Co-PhPh характерны агрегаты двух типов: плоские дискообразные с размерами от 50 до 300 нм и более крупные ассоциаты неправильной формы с размерами более микрона (1 мкм), которые, судя по всему, являются более сложными системами, образованные из мелких агрегатов. Для комплекса Co-PhBn характерны образования сферических капсул, включающих более мелкие частицы. Размеры капсул в среднем 2 мкм, а внутренних частиц – 200 нм. Для комплекса Co-PhPhPh установлено образования агрегатов в виде крупных массивов отдельных частиц. Размеры частиц колеблются в диапазоне от 80 до 150 нм. По результатам проделанной работы можно сделать вывод о том, что морфология дифосфиновых комплексов кобальта отличаются друг от друга и можно предположить, что каталитическая активность данных комплексов будет так же различной.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, научный проект № 17-08-01454А

УДК 66.071.6.081.6, 66.069.85

ГАЗОТРАНСПОРТНЫЕ И СОРБЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ПОЛИПЕРФТОР(2-МЕТИЛ-2-ЭТИЛ-ДИОКСОЛА-1,3)

Никифоров Р.Ю.^а, Полунин Е.В.^б, Белов Н.А.^а

^а*Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН
119991, г. Москва, Ленинский проспект, д. 29*

^б*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН
119991, г. Москва, Ленинский проспект, д. 47
e-mail: nru@ips.ac.ru*

Перфторированные полимеры образуют уникальный класс полимерных материалов благодаря сочетанию различных свойств (высокая термическая и химическая стойкости и др.). Небольшое их число может успешно применяться в газоразделении. В данной работе изучаются газотранспортные параметры полиперфтор(2-метил-2-этил-диоксола-1,3) PPFMED.

PPFMED был синтезирован радикальной полимеризацией PFMED при 280°C и давлении 8-12 кбар. РНФР ($T_{ст.} = 235^\circ\text{C}$, плотность 1.85 г/см³) является аморфным и при комнатной температуре растворим в обычных перфторированных растворителях (перфтордиметилциклогексан, перфтортолуол, перфторбензол) и имеет хорошие пленкообразующие свойства. Коэффициенты проницаемости (P) и диффузии (D) He, H₂, O₂, N₂, CO₂, CH₄ определялись по методу Дейнеса-Баррера на барометрической установке Баротрон в интервале температур 20-50°C. Коэффициенты растворимости (S) O₂, N₂, CO₂, CH₄ определялись объемным методом с хроматографическим детектированием в интервале температур 20-70°C. При рассмотрении полученных коэффициентов проницаемости газов, PPFMED можно отнести к группе высокопроницаемых полимеров, и значения P приближаются к P наиболее проницаемого перфторированного полимера AF2400 и гораздо выше, чем в сополимере AF1600. Значения идеального фактора разделения для выбранных пар газов (He/CH₄, N₂/CH₄) для PPFMED находятся возле верхней границы диаграммы Робсона и лежат рядом с AF2400.

УДК 66.071.6.081.6, 66.069.85

СОРБЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ПОЛИПЕРФТОР(2-МЕТИЛ-2ЭТИЛ-ДИОКСОЛА-1,3)**Никифоров Р.Ю.^а, Полунин Е.В.^б, Белов Н.А.^а**^а*Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН
119991, г. Москва, Ленинский проспект, д. 29*^б*Институт органического химии им. Н.Д. Зелинского РАН,
119991, г. Москва, Ленинский проспект, д. 47
e-mail: nru@ips.ac.ru*

Перфторированные полимеры образуют уникальный класс полимерных материалов благодаря сочетанию различных свойств (высокая термическая и химическая стойкости и др.). Небольшое их число может успешно применяться в газоразделении. В данной работе изучаются температурные зависимости сорбции полиперфтор(2-метил-2-этил-диоксола-1,3) PPFMED.

PPFMED был синтезирован радикальной полимеризацией PFMED при 235°C и давлении 8 кбар. РНФР ($T_{ст.} = 235^\circ\text{C}$, плотность 1.85 г/см³) является аморфным и при комнатной температуре растворим в обычных перфторированных растворителях (перфтордиметилциклогексан, перфтортолуол, перфторбензол) и имеет хорошие пленкообразующие свойства. Коэффициенты растворимости (S) O₂, N₂, CO₂, CH₄ определялись объемным методом на хроматографе в интервале температур 20-70°C. На основе данных S были построены температурные зависимости в аррениувских координатах и рассчитаны кажущиеся теплоты сорбции для исследуемых газов.

УДК 541.64

ФАЗОВОЕ РАВНОВЕСИЕ И ВЗАИМОДИФФУЗИЯ В СИСТЕМАХ С НКТС¹

Никулова У.В., Чалых А.Е.

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4
e-mail: ulianan@rambler.ru*

Известно, что наиболее важной термодинамической информацией для растворов и расплавов полимеров является диаграмма фазового состояния. Особое внимание привлекают диаграммы, характеризующиеся наличием нижней критической температуры смешения (НКТС). Причины распада системы на фазы при повышении температуры для каждой системы свои, но чаще всего подобный эффект связывают с наличием специфических взаимодействий между компонентами.

В работе проведен сравнительный анализ экспериментальных и литературных данных по таким системам с НКТС как ПВМЭ-ПС, ПВМЭ-вода, ПВКЛ-вода, ПЭГ-вода, ПВХ-Полиэтилакрилат. Представлены данные по диаграммам фазового равновесия этих систем, оценены термодинамические параметры смешения Флори-Хаггинса, проанализированы его температурные зависимости. Для ряда систем получены данные по коэффициентам взаимодиффузии компонентов. Построены их зависимости от концентрации, температуры и молекулярной массы. Показано, что для систем с НКТС наблюдается необычные температурные зависимости коэффициентов диффузии, связанные с резким падением трансляционных коэффициентов к бинадальным кривым. Предполагается, что этот эффект связан с вкладом в значение коэффициентов диффузии термодинамической поправки.

¹ Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 17-03-00197, и в рамках Госзадания, регистрационный номер АААА-А18-118030690046-0

УДК 544.72

ДЕГРАДАЦИЯ МОДЕЛЬНЫХ МЕМБРАН НА ОСНОВЕ СФИНГОМИЕЛИНА, СОДЕРЖАЩИХ ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОР, ПРИ ИК-ОБЛУЧЕНИИ¹

Новак Д.Н.^{а,б}, Шокуров А.В.^а, Грин М.А.^б, Райтман О.А.^а, Арсланов В.В.^а,
Селектор С.Л.^а

^аЛаборатория физической химии супрамолекулярных систем,
Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4

^бМосковский технологический университет
119571, г. Москва, проспект Вернадского, д. 86
e-mail: sofs@list.ru

На сегодняшний день фотодинамическая терапия (ФДТ) с использованием фотосенсибилизаторов (ФС), поглощающих свет в ближней ИК-области спектра, представляется наиболее перспективной для клинического применения благодаря возможности лечения глубокозалегающих и пигментированных опухолей. Однако, механизм действия ФС на процесс разрушения клеточных мембран остается недостаточно ясным, что определяет актуальность исследований на модельных системах. В данной работе, в качестве исследуемого ФС был выбран дипропоксибактериопурпуринимид (DP5), имеющий полосы поглощения в ближней ИК-области спектра (около 807 нм), а липидный бислои, в который вводился ФС, формировался на основе сфингомиелина (SPH) – распространенного в живой природе структурного липида (рис. 1). С

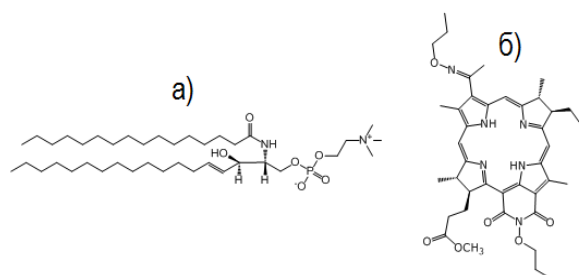


Рис. 1. Структурные формулы SPH (а) и DP5 (б)

помощью *in situ* оптоволоконной спектроскопии показано, что в смешанном монослое DP5:SPH фотосенсибилизатор находится в неагрегированном состоянии. Исходя из полученных изотерм сжатия, спектров поглощения смешанных монослоев и

данных о совместимости компонентов определено оптимальное соотношение компонентов. Разработана методика формирования как индивидуальных липидных бислоев SPH так и бислоиных мембраны, содержащих ФС, на твердых подложках

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, № 16-53-150006 НЦНИ_а

для дальнейшего исследования их фотодегradации под действием ИК-излучения. Методами измерения краевых углов смачивания, поверхностного плазмонного резонанса и электрохимического импеданса проведены сравнительные исследования индивидуального липидного бислоя SPH и такого же бислоя, содержащего ФС. Показано, что целостность липидного бислоя без ФС сохраняется под действием ИК-облучения на продолжительном отрезке времени, тогда как бислоем, содержащим DP5 в мольном соотношении 1:10 разрушается уже при небольших временах экспозиции образцов.

УДК 541.64:539.2:537.5

СТРУКТУРА БИОПОЛИМЕРНЫХ ВОЛОКНИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ С КОМПЛЕКСАМИ ПОРФИРИНА¹Ольхов А.А.^{а,б,в}, Тюбаева П.М.^{а,в}, Карпова С.Г.^в, Лобанов А.В.^б, Попов А.А.^{а,в},
Иорданский А.Л.^б^а*Российский экономический университет им. Г. В. Плеханова
117997, г. Москва, Стремянный переулок, д. 36*^б*Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН
119991, г. Москва, ул. Косыгина, д. 4*^в*Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН
119334, г. Москва, ул. Косыгина, д. 4
e-mail: aolkhov72@yandex.ru*

Работа посвящена созданию и исследованию перспективных матриц с антисептическими свойствами на основе нано- и микроволокнистых нетканых материалов, получаемых методом электроформования (ЭФ). Метод основан на вытягивании полимерного раствора в тонкую струю в поле действия механических и электростатических сил и формированием волокна с диаметрами от 10 нм до 10 мкм.

Для формования волокон использовали биополимер – полигидроксибутират (ПГБ) серии 16F, полученный методом микробиологического синтеза компанией BIOMER® (Германия). В качестве модифицирующего вещества для создания волокнистых матриц с антисептическими свойствами использовали комплекс железа (III) с тетрафенилпорфирином (FeClTPP). Концентрация ПГБ в растворе составляла 7% мас. Содержание FeClTPP в формовочном растворе составляло 1, 3, и 5% мас. относительно массы ПГБ. Исследование структуры образцов проводили методами ДСК (DSC 204 F1, Netzsch) СЭМ (сканирующий электронный микроскоп «Hitachi TM-3000»).

В данной работе, сочетая методы ДСК и СЭМ, мы представили результаты влияния комплекса порфирина на кристалличность и морфологию нетканых материалов на основе ультратонких волокон ПГБ. Введение малых концентраций порфирина, приводит к заметным изменениям кристаллической организации ПГБ и

¹ Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского экономического университета им. Г.В. Плеханова и РФФИ, грант № 15-29-04862 офи_м (Горшенев В.Н.); и за счет субсидии, выделенной ИХФ РАН на выполнение Госзадания, № темы ФАНО 0082-2014-0009, № гос. регистрации АААА-А17-117040610309-0 (Иорданский А.Л.). Измерения проводились с помощью оборудования ЦКП «Новые материалы и технологии» ИБХФ РАН

как отклик на изменение геометрических параметров и плотности упаковки волокон. Биологические испытания нетканых материалов показали, что волокна, содержащие FeСІТФП, активны в отношении бактериальных тест-культур

Полученные в данной работе волокнистые материалы ПГБ-FeСІТФП являются новым классом полимерных модификаций биологически активных соединений с бактерицидными свойствами, что обуславливает актуальность и целесообразность создания на основе полимерных волокнистых матриц и металлокомплексов порфиринов средств дезинфекции в отношении условно-патогенных и патогенных микроорганизмов.

УДК 544.77

МАКРОЦИКЛИЧЕСКИЕ ИОННЫЕ ЖИДКОСТИ: ДИЗАЙН И СВОЙСТВА¹Падня П.Л., Стойков И.И.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет
420008, г. Казань, ул. Кремлевская, д. 18
e-mail: padnya.ksu@gmail.com*

Ионные жидкости – это соли, жидкие при температуре меньше 100°C. В состав ионных жидкостей входит объемный органический катион и неорганический или органический анион, подбор катиона и аниона позволяет регулировать их свойства в широких пределах.

В данной работе был синтезирован ряд производных *n*-трет-бутилтиакаликс[4]арена, содержащих амидные и четвертичные аммониевые и имидазолиевые фрагменты по нижнему ободу. Был проведен анализ зависимости температуры плавления макроциклов от природы и длины заместителей при четвертичных атомах азота. Структура полученных макроциклов была подтверждена рядом физико-химических методов – ИК, ЯМР ¹H, ¹³C спектроскопией, ESI масс-спектрометрией, а состав – данными элементного анализа. Был получен ряд солей, имеющих температуру плавления меньше 100°C, что соответствует определению ионной жидкости по ИЮПАК.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, № 16-33-60141 мол_а_дк, и стипендии Президента Российской Федерации для молодых ученых и аспирантов, осуществляющих перспективные научные исследования и разработки по приоритетным направлениям модернизации российской экономики, СП-3597.2016.4

УДК 546.222.4: 661.8...516: 544.18

НАСКОЛЬКО ХОРОШО КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ОПИСЫВАЮТ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ СТРОЕНИЕ ПОЛИСУЛЬФИДОВ

Панкратьев Е.Ю.

*Уфимский федеральный исследовательский центр РАН
450054, г. Уфа, пр. Октября, д. 71
e-mail: evgeniy@pankratyev.com*

На примере молекул S_2 , S_2^+ , S_2H_2 , S_8 произведено сравнение экспериментальных и расчетных данных геометрического строения (длины связей S-S и S-H) полисульфидов. Показано (табл. 1), что квантово-химические приближения PBE/PBE/ Λ 22 и CAM-B3LYP/aug-CC-pVTZ характеризуются наименьшим значением средне-квадратичного отклонения (rms.) между теоретическими и экспериментальными данными.

Табл. 1. Статистические характеристики квантово-химических методов, Å

Метод	min	max	avg.	rms.	min	max	avg.	rms.
«ПРИРОДА»	Нерелятивистский				Скалярно-релятивистский			
PBE/PBE/ 3ζ	0.021	0.043	0.034	0.034	–	–	–	–
PBE/PBE/ Λ 2	0.021	0.037	0.031	0.032	0.021	0.037	0.031	0.032
PBE/PBE/ Λ 3	0.021	0.037	0.031	0.031	0.021	0.037	0.031	0.031
PBE/PBE/ Λ 22	0.021	0.037	0.030	0.030	0.021	0.037	0.030	0.030
PBE/PBE/ Λ 33	0.020	0.037	0.029	0.030	0.021	0.037	0.029	0.030
«Gaussian»	6-311+G(d,p)				aug-CC-pVTZ			
PBE/PBE	0.021	0.047	0.034	0.035	0.021	0.037	0.031	0.032
TPSSTPSS	0.021	0.043	0.034	0.034	0.021	0.037	0.031	0.031
M06L	0.021	0.037	0.029	0.030	0.011	0.037	0.027	0.029
B3LYP	0.021	0.038	0.033	0.033	0.021	0.037	0.030	0.031
PBE1PBE	0.018	0.037	0.029	0.030	0.006	0.037	0.026	0.029
TPSSh	0.021	0.037	0.031	0.032	0.018	0.037	0.029	0.030
M06	0.021	0.037	0.030	0.031	0.014	0.037	0.028	0.029
LC- ω PBE	0.013	0.037	0.028	0.029	0.019	0.037	0.029	0.030
CAM-B3LYP	0.015	0.037	0.028	0.029	0.004	0.037	0.026	0.029
CCSD	0.021	0.037	0.030	0.031	0.014	0.037	0.035	0.033
	SVP				TZVP			
B3LYP	0.021	0.037	0.032	0.032	0.021	0.042	0.033	0.034
	6-31+G(d,p)				aug-CC-pVDZ			
B3LYP	0.021	0.039	0.033	0.033	0.021	0.045	0.034	0.035

УДК 541.64:539.199

КЛЕТОЧНЫЙ ЭФФЕКТ И ЛИНИЯ ФРЕНКЕЛЯ НА ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЕ

Пестряев Е.М.

*Уфимский государственный нефтяной технический университет
450062, г. Уфа, ул. Космонавтов, д. 1
e-mail: physics_usptu@mail.ru*

Методом молекулярной динамики исследованы коэффициенты самодиффузии (КСД) и времена жизни – τ -частиц леннард-джонсовской жидкости в первой координационной сфере (ПКС) своих соседей для коэффициентов упаковки системы ϕ от 0.1 до 0.8. Оказалось, что распределение τ характеризуется широким пиком в области коротких времен, простирающимся на несколько десятичных порядков. Показано, что использование координационного числа Z в качестве аргумента исследованных характеристик наглядно демонстрирует процесс возникновения и развития клеточного эффекта. Наблюдаемая зависимость КСД от ϕ описывается одной из последних теорий самодиффузии [1], исключая газообразное состояние системы, для которых уравнение и не предназначалось. Интервал Z , в котором начинается и заканчивается конденсация системы ($5 \div 7$) совпадает с его теоретическим значением [2], необходимым для замыкания клетки. Окончание процесса замыкания клетки приводит к возможности распространения в среде высокочастотных поперечных звуковых волн и, согласно определению [3,4], переводит жидкость из «мягкого» состояния в «твердое», характеризующееся сдвиговой вязкостью. Положение этого перехода на фазовой диаграмме при изменении термодинамических параметров образует непрерывную кривую, обнаруженную недавно в экспериментах и названную линией Френкеля [3,4], который ввел в теорию жидкостей понятие клеточного эффекта [5,6].

Литература

1. Bretonnet J.-L. Journal of Chemical Physics, 2002. V. 117, № 20. P. 9370-9373.
2. Peters E.A.J.F. et al. Physical Review E, 2001. V. 63, № 2. P. 021404(8).
3. Brazhkin V.V. et al. Physical Review E, 2012. V. 85, № 3. P. 031203(3).
4. Бражкин В.В. и др. Успехи физических наук, 2012. Т. 182, № 11. С. 1137-1156.
5. Frenkel J. Zeitschrift für Physik, 1926. V. 35, № 8. P. 652-669.
6. Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей. Л: Наука, 1975. 442 с.

УДК 541.18.02.025

СОРБЦИЯ И ДИФФУЗИЯ ВОДЫ В ПРИВИТЫХ СОПОЛИМЕРАХ ХИТОЗАНА И ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА¹

Петрова Т.Ф., Чалых А.Е., Акопова Т.А., Озерин А.Н.

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4
e-mail: petrtrtt@mail.ru*

В качестве объектов исследования использовали порошки привитых сополимеров хитозана с ПВС, полученные разработанным в ИСПМ РАН способом безрастворного модифицирования полисахаридов.

Результаты исследования полученных продуктов методами ИКС и элементного анализа свидетельствовали об их сополимерном строении. Для измерения сорбционных характеристик наряду с индивидуальными продуктами использовали их смеси, приготовленные из растворов 10% ПВС в воде и 5% раствора хитозана в 2% уксусной кислоте. Фазовый состав и структуру пленок и порошков исследовали методами сканирующей электронной микроскопии, ДСК и рентгеноструктурного анализа. Сорбцию паров воды проводили методами статической сорбции и неизотермической десорбции.

Показано, что для всех исследованных образцов изотермы сорбции S-образны и могут быть аппроксимированы в суперпозиции изотерм Лэнгмюра и Флори-Хаггинса. Определена предельная сорбционная емкость локализованной воды в полисахаридах и ПВС. Определены коэффициенты диффузии воды и рассчитаны эффективные энергии активации воды, которые в хитозане составляют 70 кДж/Моль.

Установлено, что сорбционная емкость привитых сополимеров ниже сорбционной емкости гибридных сорбентов. Предполагается, что в процессе механохимической активации происходит взаимодействие гидроксильных групп ПВС и хитозана с образованием насыщенных водородных связей.

¹ Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 17-03-00197, и в рамках Госзадания, регистрационный номер АААА-А18-118030690046-0

УДК 541.18.02.025

ЭВОЛЮЦИЯ ИЗОТЕРМ СОРБЦИИ ПАРОВ ВОДЫ ГИДРОФИЛЬНЫМИ ПОЛИМЕРАМИ В ПРОЦЕССЕ ТЕРМИЧЕСКОГО ОТЖИГА СОРБЕНТОВ¹

Петрова Т.Ф., Чалых А.Е., Герасимов В.К.

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4
e-mail: petrtrtt@mail.ru*

В качестве объектов исследования использовали порошки и пленки целлюлозы, эфиров целлюлозы, хитина и хитозана, ПВС, сополимеров хитозана с ПВС с молекулярной массой ~ 40 кДа, степень кристалличности от 15 до 30% масс. Фазовый состав и структуру порошков исследовали методами электронной микроскопии, ДСК, рентгеноструктурного анализа. Сорбцию паров воды получали методом статической сорбции. Отжиг образцов перед сорбционными измерениями проводили в интервале температур от 80 до 220°C, время отжига варьировали от 1 до 3 часов.

Показано, что для всех исследованных гидрофильных полимеров изотермы сорбции S-образны и могут быть аппроксимированы суперпозицией изотерм Лэнгмюра и Флори-Хаггинса. По Лэнгмюровской составляющей рассчитан избыточный свободный объем и определена доля активных центров, участвующих в сорбционном процессе. Результаты расчетов согласуются с данными аннигиляции позитронов.

Для всех исследованных образцов термический отжиг приводит к постепенному вырождению лэнгмюровской составляющей и переходу изотерм сорбции к изотермам Флори-Хаггинса. Высказано предположение, что формирование избыточного свободного объема связано с процессами десорбции воды и стеклованием полимерной матрицы, в которой формируются участки сетки водородных связей с низкой степенью насыщенности. Предложен механизм заполнения свободного объема молекулами сорбента.

¹ Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 17-03-00197, и в рамках Госзадания, регистрационный номер АААА-А18-118030690046-0

УДК 538.913.622.241:532.526.4

МНОГОМАСШТАБНАЯ 4D МОДЕЛЬ ИНТЕГРАЦИИ ЭВОЛЮЦИИ СИСТЕМ И НЕФТИ ПО ФОРМУЛЕ А. ЭЙНШТЕЙНА

Попков В.И.^{а,б}, Штеренберг А.М.^а, Гусев В.В.^а, Крестелев А.И.^а, Попкова А.В.^б

^аСамарский государственный технический университет
443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, д. 244

^бСамарский научно-исследовательский и проектный институт нефтедобычи
443010, г. Самара, ул. Вилоновская, д. 18
e-mail: popkov_vi@mail.ru

Энергетический, социально-экологический кризис перелома экономик рынка, популизм политиков и завышенные ожидания от технологий – список самых серьезных глобальных рисков столетия. Для аддитивного управления этими



Рис. 1. Гетерогенно-фазовая эволюция U_f синергии геофизических ритмов f_i , фотонов, бозонов, газа и микроэлементов в миниатюре «Петрофизика», Попкова А.В.

технологиями необходимы системно интегрированные модели. Но, пока мусорные ДНК участвуют в развитии мозга, а изомерные технологии – в улучшении мусорных нефтяных систем, а фантомные структуры – в росте экономик, системная интеграция синтеза

невозможна, поскольку эволюция не в создании мусора [1]. Однако, молекулярный и космический хаос, как граничные условия этих задач, носит гармонический характер синергии реликтовых излучений фотонов, бозонов и пыли: от фотонов к глине и опять к пыли [2]. Если математическое пространство может разрываться, а физическое время заканчиваться, то эволюция непрерывна и не останавливается. Предложено динамическое решение уравнения Навье-Стокса комплексированной маршрутизации сланцевого и карбонатного уплотнения систем и роботизированных технологий со стартом гетерогенной реакции фотосинтеза $6CO_2 + 6H_2O + hv \rightarrow C_6H_{12}O + 6O_2$ более 4 млрд. л. назад.

Гетерогенные реакции протекают на разделе фаз с образованием пленок (рис. 1). Капли образуются гомогенно в объеме. Условия определяют критический размер зародыша для испарения и величину энергетического барьера для роста. И

гетерогенно, когда связи внутри формирующейся новой фазы сильнее, чем с поверхностью. Во всех случаях появляются «бесконечные» производные деформации. Фотон выступает калибровочной константой $\hbar \sim h\nu$ энергии покоя и роста $E(\mathbf{u}, t) = \rho V C^2 + \int_V \int_T \rho \langle uv \rangle dt dx$, могут быть др.

Энергия E – сорбционная интеграция по формуле А. Эйнштейна [2], корреляции $\langle \rangle$ плотности ρ объема V , времени T , подвижности $U(\mathbf{u}, t) = \int_V \int_T \sum e^{-kx - i\omega t} dt dx$ гетерогенных многокомпонентных систем наноструктур пористых адсорбентов, слоистых мембранных материалов коллоидных, дисперсных систем и плазменных фильтров. Нефть выступает эволюционно-топологическим объектом геофизической синергии органического вещества [3] структурно-пассионарной карбонизации адсорбции поглощения-отражения.

Литература

1. Тимурзиев А.И. «Октябрьские тезисы», или о начале второго этапа подготовки научной революции по смене парадигмы нефтегазовой геологии в России. Недропользование XXI век, 2017. № 1. С. 116–120.
2. Попков В.И., Штеренберг А.М., Пчела К.В., Горнов Д.А. Моделирование стадийной геологии геологоразведочных работ для бурения на этапах разработки сложных коллекторов с использованием формулы А. Эйнштейна. 8я EAGE Международная геологическая и геофизическая конференция и выставка. Инновации в геонауках – время открытий. Санкт Петербург, 2018. 4 с.
3. Попков В.И., Штеренберг А.М., Митина Е.В., Попкова А.В. Структурно-динамическая синергия геофизических ритмов диагенеза коллекторов нефти эволюционно-топологического решения уравнения Навье-Стокса. Структура и динамика молекулярных систем. Яльчик, 2017. С. 101.

УДК 541.18.042.2:678.745

ГИБРИДНЫЕ ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ НАНОКОМПОЗИТЫ НА ОСНОВЕ ПРИРОДНЫХ И СИНТЕТИЧЕСКИХ (СО)ПОЛИМЕРОВ В ПРОЦЕССАХ ФЛОКУЛЯЦИИ SiO₂¹

Проскурина В.Е., Шилова С.В., Булидорова Г.В., Галяметдинов Ю.Г.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет
420015, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68
e-mail: v_proskurina@mail.ru*

Полисахариды являются основой новых инновационных материалов для применения в разных областях науки, техники и медицины. Это связано с ростом интереса к различным видам модификации полисахаридов с целью получения материалов со специальными свойствами. В работе показан процесс флокуляции наносиликатных дисперсных систем водорастворимыми природными (пектин, желатин, хитозан) и синтетическими (ионогенные сополимеры акриламида – АА) полимерами и гибридными полифункциональными композитами на их основе. Гибридные системы охарактеризованы методом ИК-спектроскопии. В качестве дисперсной фазы служили образцы SiO₂ с размерами частиц 32, 46, 279, 729 нм. Фазовое разделение суспензий, состоящих из сферических нанодисперсных частиц SiO₂ минимального размера с участием природных и синтетических полимеров, может быть рассмотрено с точки зрения вытеснительной флокуляции, происходит выталкивание полимерных цепей от поверхности частиц дисперсной фазы в объем дисперсионной среды. Методом динамического светорассеяния определены размеры структурных единиц золя SiO₂, агрегатов-флокул и величины электрокинетических потенциалов. Полученный результат позволил спрогнозировать оптимальный режим флокуляции нанодисперсных частиц SiO₂ с участием выбранных перспективных органических гибридов.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 18-03-00099

УДК 541.64:539.199

СВОЙСТВА УГЛЕВОДОРОДНЫХ ЦЕПЕЙ ЛИПИДОВ ПРИРОДНЫХ МЕМБРАН И НЕКРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ СИММЕТРИЙНЫЕ ИНВАРИАНТЫ В ИХ СТРУКТУРЕ¹

Рабинович А.Л.^a, Галис А.Л.^b

^a*Институт биологии КарНЦ РАН
185910, г. Петрозаводск, ул. Пушкинская, д. 11*

^b*Институт элементоорганических соединений им. А.Н.Несмеянова РАН
119991, г. Москва, ул. Вавилова, д. 28
e-mail: rabinov@krc.karelia.ru, talishome@mail.ru*

Исследование структурной организации, физических свойств и молекулярных механизмов функционирования природных мембран, комплексов мембранных систем, требует решения одной из фундаментальных научных задач данной области: установления взаимосвязей между химическим строением липидных компонентов природных мембран, физическими свойствами и функциональными особенностями разных мембранных структур. Наиболее адекватное решение этой задачи может быть достигнуто лишь при сочетании разных уровней ее рассмотрения. Известно, что строение углеводородных цепей фосфолипидов биомембран характеризуется рядом общих особенностей. В настоящей работе развивается концепция, согласно которой эти особенности определяются соответствием строения цепей некоторой фундаментальной системе конструкций алгебраической геометрии. Рассмотрение проблемы на абстрактно-математическом уровне позволяет выявить симметричные инварианты в строении углеводородных компонентов молекул липидов, и место цепей соответствующей структуры среди всех теоретически возможных вариантов, их роль в общей картине искомых взаимосвязей. Отображение этой системы абстрактных конструкций на структурный уровень определяет «некристаллографическую» симметрию цепей. Особенности химического строения цепей обеспечивают наличие у них надлежащих физических свойств и в итоге – осуществление мембраной ряда биологических функций.

¹ Работа выполнена по теме № 0221-2017-0050, грант № АААА-А17-117031710039-3

ИССЛЕДОВАНИЕ УЛЬТРАТОНКИХ ПОЛИМЕРНЫХ СИСТЕМ МЕТОДОМ ПОВЕРХНОСТНОГО ПЛАЗМОННОГО РЕЗОНАНСА¹

Райтман О.А.

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4
e-mail: rightman@mail.ru*

Разработка новых полимерных материалов и изучение их свойств является одним из актуальных направлений современной химии высокомолекулярных соединений. Огромное количество новых полимерных систем широко внедряется и используется при производстве электрических приборов, в сенсорике, оптоэлектронике и др. В то же время, для исследования таких систем и изучения происходящих в них процессов требуется создание новых методов анализа, отличающихся низким пределом обнаружения, высокой селективностью и экспрессностью, возможностью использования их «вне лаборатории». Одним из новых методов для изучения поведения супрамолекулярных систем является спектроскопия поверхностного плазмонного резонанса (ППР), обладающая несомненными преимуществами перед громоздкими и сложными спектрометрами, проведение одного эксперимента на которых занимает довольно продолжительное время. В лекции рассмотрены особенности применения спектроскопии поверхностного плазмонного резонанса (ППР) для исследования оптических и структурных характеристик ультратонких (до 500 нм) полимерных систем. Особое внимание уделено использованию спектроскопии ППР для изучения процессов, происходящих в ультратонких пленках молекулярно-импринтированных полимеров и композиционных материалов.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты №№ 17-53-16018 НЦНИЛ_а и 18-03-01131_А

УДК 544.72:541.183+547.992

ТЕНЗИОМЕТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЭТОКСИЛИРОВАННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ГУМИНОВЫХ КИСЛОТ НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА ЖИДКОСТЬ-ГАЗ

Рогатко М.И., Хилько С.Л., Семенова Р.Г., Макарова Р.А.

Институт физико-органической химии и углекислоты
83114, г. Донецк, ул. Р. Люксембург, д. 70
e-mail: sv-hilko@yandex.ru

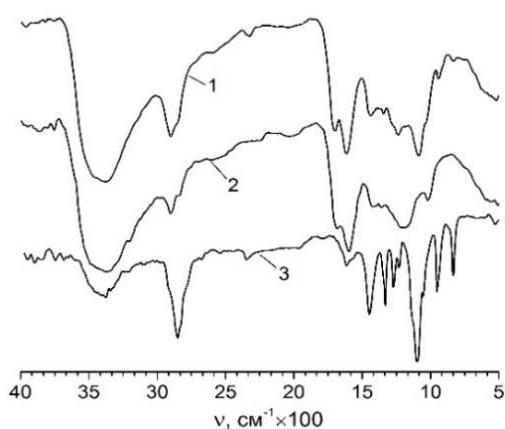


Рис. 1. ИК спектры образцов (в таблетках KBr): 1) ГК + ПЭГ + NaOH, 2) исходный образец ГК, 3) ПЭГ-6000 + NaOH).

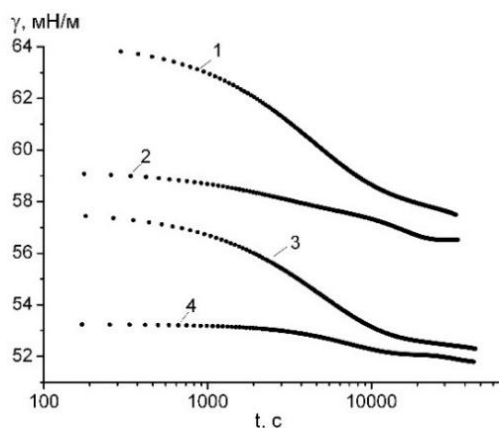


Рис. 2. Изменение динамического поверхностного натяжения (γ) от времени. С, %: 0.1 (1, 2) и 1.0 (3, 4) для нативного гумата натрия (1, 3) и этоксилированного производного (2, 4).

Целью работы было проведение реакции этоксилирования гуминовых кислот (ГК) механохимическим методом в присутствии полиэтиленгликоля (ПЭГ-6000) и NaOH в вибрационном аппарате 75Т-ДрМ (частота вибрации $\nu = 50$ Гц, амплитуда $A = 3-5$ мм, виброускорение, $I = 4\pi^2 A \nu^2$, 300-490 м/с²). В ИК-спектре (рис. 1) модифицированного образца ГК появляется полоса поглощения 1100 см⁻¹, которая соответствует валентным ν_{C-O} колебаниям эфирной группы (-CH₂-O-CH₂-). Эта полоса наблюдается в ИК спектре ПЭГ-6000, но отсутствует в немодифицированном образце ГК.

Динамическое поверхностное натяжение водных растворов ПАВ (метод кольца Дю Нуи, тензиометр TE-1, Lauda, Germany) существенно ниже для этоксилированного образца ГК по сравнению с нативной формой (рис. 2).

Таким образом, механохимическим методом могут быть получены более эффективные поверхностно-активные вещества.

УДК 544.164

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ СВОЙСТВ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК «ЯДРО/ОБОЛОЧКА»¹

Романова К.А., Крайнов А.А., Галяметдинов Ю.Г.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет
420015, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68
e-mail: ksenuya@mail.ru*

Теоретическое моделирование, обеспечивающее надежный результат, необходимо для систематического изучения, объяснения и прогнозирования свойств² полупроводниковых квантовых точек (КТ). Функциональные материалы на основе КТ могут проявлять разнообразные свойства в зависимости от формы, размера, природы КТ и их оболочек. Было проведено сравнение теоретически рассчитанных свойств гибридных КТ селенидов и сульфидов кадмия и цинка различного диаметра, покрытых оболочкой различной толщины из полупроводникового материала. Результаты расчетов согласуются с экспериментальными данными. Произведена оценка влияния радиуса КТ и природы оболочки на положение валентной зоны, зоны проводимости и на ширину запрещенной зоны. Установлено, что использование в качестве оболочки сульфида кадмия приводит к уменьшению эффективной ширины запрещенной зоны, что смещает излучение в красную область спектра. Увеличение эффективности люминесценции можно достичь при использовании в качестве оболочки сульфида цинка вследствие локализации электрон-дырочной пары внутри ядра.

Квантово-химические расчеты были проведены с использованием суперкомпьютера МВС-100К «Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН» и вычислительных ресурсов системы «Ломоносов» суперкомпьютерного комплекса МГУ им. М.В. Ломоносова.

Литература

1. Romanova K.A., Freidzon A.Ya., Bagaturyants A.A., Galyametdinov Yu.G. Journal of Physical Chemistry A, 2014. 118. P. 11244.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-33-00062 мол_a

УДК 544.77:535.37

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ПАРАМАГНИТНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК МЕТОДОМ ЭПР¹

Сагдеев Д.О.^а, Шамилов Р.Р.^а, Воронкова В.К.^б, Суханов А.А.^б,
Галяметдинов Ю.Г.^{а,б}

^аКазанский национальный исследовательский технологический университет
420015, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68

^бКазанский физико-технический институт им. Завойского КазНЦ РАН
420029, г. Казань, ул. Сибирский тракт, д. 10/7
e-mail: demsagdi@yandex.ru

Наночастицы полупроводников, легированные парамагнитными ионами – парамагнитные квантовые точки, представляют интерес в качестве перспективного материала для медицинской визуализации и спиновой электроники.

В работе проанализировано влияние наращивания оболочки из сульфида цинка на парамагнитные квантовые точки (ПКТ) Mn:CdS на их магнитные свойства.

Показано, что спектры ЭПР данных ПКТ состоят из двух накладывающихся

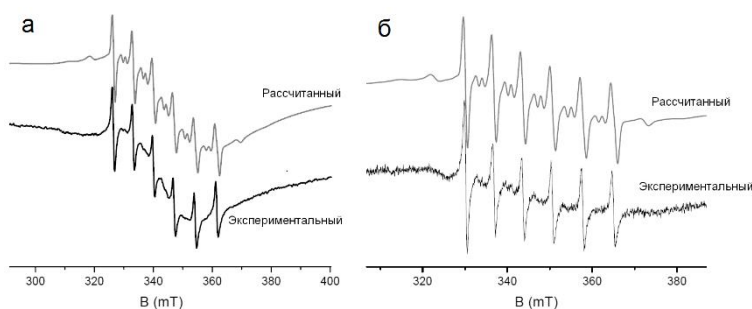


Рис. 1. ЭПР-спектры парамагнитных квантовых точек Mn:CdS (а) и Mn:CdS / ZnS (б)

компонент: шести линий сверхтонкого расщепления, характерных для одиночных ионов марганца в решетке и он кластеров ионов Mn^{2+} .

Установлено, что по мере наращивания оболочки увеличивается отношение сигнала от одиночных ионов

марганца к сигналу от кластеров, что, вероятно, происходит как результат процесса самоочистки нанокристаллов CdS при высоких температурах, при котором происходит распад кластеров MnS и диффузия ионов марганца в кристаллической решетке CdS.

¹ Работа выполнена при финансовой РФФИ, грант № 17-03-00258-А

УДК 541.64:66.095.26

ОСОБЕННОСТИ ПОРООБРАЗОВАНИЯ ПОЛИУРЕТАНОВ НА ОСНОВЕ АМИНОЭФИРОВ БОРНОЙ КИСЛОТЫ

Сазонов О.О., Емелина О.Ю., Каюмов М.Н., Дулмаев С.Э., Давлетбаева И.М.

Казанский национальный исследовательский технологический университет
420015, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68

Для создания стерических затруднений и разделенных в пространстве ионных пар в составе АЭБК-ПЭГ предварительно были получены как бифункциональные, так и трехфункциональные аддукты (ЭМ), основанные на двух стадийном взаимодействии диглицидилового эфира 4,4'-дигидрокси-2,2-дифенилпропана (эпоксидной смолы ЭД-20) с моноэтаноламином (МЭА).

Затем на основе АЭБК-ПЭГ и ЭМ были получены аминоэфиры борной кислоты (АЭБК-ЭМ), содержащие в одном из ответвлений ЭМ. Наличие свободных групп В-ОН в составе АЭБК-ЭМ (установленных с использованием спектроскопии

ЯМР ^{11}B) и вторичного амина ведет к образованию бората вторичного аммония.

Морфология поверхности образцов была изучена с использованием АСМ (рис. 1). Снимки АСМ подтверждают формирование пор в исследуемых полиуретанах. Наибольшие размеры пор достигаются для АЭБК-ЭМБ-ПУ.

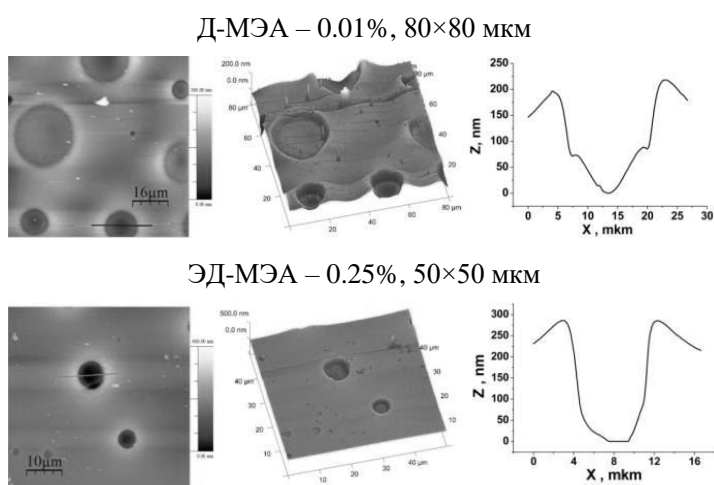


Рис. 1. АСМ-снимки поверхности образцов АЭБК-ЭМ-ПУ полученных при различном содержании ЭМ

УДК 539.143.4

ФОРМИРОВАНИЕ ГЭП НА ЯДРАХ LA В СИСТЕМЕ La_2CuO_4

Сафонова О.А., Шайдуллин Ф.Р., Ахметзянова Г.И., Погорельцев А.И.,
Матухин В.Л.

*Казанский государственный энергетический университет
420066, г. Казань, ул. Красносельская, д. 51
e-mail: oilisa12@yandex.ru*

Ранее нами было проведено экспериментальное исследование магнитного фазового перехода в купрате лантана La_2CuO_4 с использованием импульсного метода ядерного квадрупольного резонанса на ядрах ^{139}La (спин ядра $I = 7/2$). Исследовалась температурная зависимость резонансных частот для перехода $5/2 - 3/2$. Было установлено, что температура Нееля изучаемого образца составляла $T_N \sim 250\text{K}$. В настоящей работе полученные частоты были использованы для исследования особенностей формирования градиента электрического поля (ГЭП) на ядрах лантана, а также для изучения распределения электронной плотности (ЭП) в области квадрупольного ядра La в немагнитной фазе ($T \sim 270\text{K}$). Использовался кластерный подход – исследовался кластер $\text{La}_{10}\text{Cu}_5\text{O}_{25}^n$. Оценки ГЭП на ядрах лантана первоначально были выполнены в рамках самосогласованного ограниченного метода Хартри - Фока с открытыми оболочками (SCF-LCAO-ROHF) с использованием базиса MIDI, затем использовался DFT режим. Резонансные частоты определялись с использованием численного решения соответствующего секулярного уравнения для спина $I = 7/2$. Ближайшая к фазовому переходу измеренная «немагнитная» резонансная частота составляла $\nu_Q \sim 12.36\text{МГц}$.

При проведении предварительных исследований влияния недостатка кислорода на градиент электрического поля (ГЭП) в области ядра La, выяснилось, что отсутствие «парного» кислорода (например, O_{30} в паре с La_8) резко, практически на порядок, понижает ГЭП ($\nu_Q \sim 1.2\text{МГц}$) на лантане. Поэтому можно предположить, что ГЭП на лантане формируется в первую очередь связью La с ближайшим атомом кислорода. В целом связи La-O можно отнести к промежуточному типу.

УДК 538.9; 54.062

МЕТОД ЯМР РЕЛАКСАЦИИ В ИССЛЕДОВАНИИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ СМЕСЕЙ ТРИГЛИЦЕРИДОВ ДЛЯ ПОКРЫТИЙ ПЕРОРАЛЬНЫХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ФОРМ

Сахаров Б.В.^а, Храмов М.В.^а, Корнюшина Т.П.^а, Волков В.Я.^б

^аГосударственный научный центр прикладной микробиологии и биотехнологии
142279, Московская область, пос. Оболенск, ФБУН ГНЦ ПМБ
e-mail: saharoff2010@yandex.ru

^бМосковский технологический университет
119571, г. Москва, пр. Вернадского, д. 86

Твердые липидные покрытия (эксципиенты) широко применяются в технологии покрытия горячим расплавом из-за их оптимальной вязкостно-температурной зависимости. В настоящей работе для исследования кристаллизации, фазовых и полиморфических превращений наполнителя для липидного покрытия, на основе бинарных смесей твердых (трипальмитин-ТП) и жидких (триолеин-ТО) триглицеридов использовали метод ЯМР релаксации в варианте комбинированной последовательности ССИ-КПМГ. Форму экспериментальных спадов СИ, регистрируемых в ходе кристаллизации, описывали по модели, представленной уравнением (1). Здесь индексы S и L относятся к твердой и жидкой компонентам спада:

$$I(t) = A_{S0} \cdot \left[(1 - f_g) \cdot \exp\left(-\frac{t}{T_{2Sa}}\right) \cdot \frac{\sin(bt)}{bt} + f_g \cdot \exp\left(-\frac{t}{T_{2Sg}}\right) \right] + \quad (1) \\ + A_{l0} \cdot \exp\left(-\frac{t}{T_{2l}}\right) \cdot \exp\left(-\frac{t}{T_{2lv}}\right).$$

По форме твердофазного компонента ССИ установлено, что кристаллизация расплава ТП и его бинарных смесей с ТО (3,5 и 10%) при 25°C приводит к быстрому затвердению ТП в α полиморфической форме, которая только в смесях трансформируется сначала в β' , а затем в β форму. Время $\alpha \rightarrow \beta$ превращения зависит от концентрации ТО и имеет суточную динамику. Кристаллизация ТП и смесей при 40°C начинается с образования α формы на первом этапе кристаллизации, но уже через несколько часов она полностью переходит в β' форму. Присутствие ТО в смеси значительно ускоряет время дальнейшего перехода формы β' в β форму, что позволяет сформировать стабильное липидное покрытие за время технологического процесса.

УДК 544.723

НАНОТЕКСТУРИРОВАННЫЙ ГИДРОКСИАПАТИТ КАК НОСИТЕЛЬ МЕДИЦИНСКИЙ РАДИОНУКЛИДОВ: ОСОБЕННОСТИ СОРБЦИИ И ДИФФУЗИИ МИКРОКОМПОНЕНТА

Северин А.В., Гопин А.В., Васильев А.Н., Власова И.Э., Пауль М.Э.,
Еникеев К.И.

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
119991, г. Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3, химический факультет
e-mail: severin@radio.chem.msu.ru*

Развитие ядерной медицины предполагает не только разработку новых радионуклидов, но и материалов для их доставки. В качестве такого носителя предлагается наногидроксиапатит (ГАП), поскольку и сам ГАП и его композиты с макромолекулами и биополимерами нашли широкое применение в медицинской практике, в частности как препараты для лечения онкологических заболеваний. Для создания на его основе нового поколения радиофармпрепаратов (РФП) необходима информация о сорбционных и диффузионных процессах, происходящих как на поверхности подобного сорбента (в зависимости от его морфологической формы), так и в его объеме.

В данной работе мы изучали сорбцию и диффузию радионуклидов ($^{223/226}\text{Ra}$, ^{207}Bi) и нерадиоактивных ионов (Bi) – аналогов перспективных терапевтических радионуклидов. В работе изучена кинетика и изотерма сорбции выбранных веществ на различных морфологических формах ГАП. Кроме того, отработана методика оценки динамики проникновения радионуклидов в ГАП (альфа-эмиттеров) с помощью трековой диагностики и в специальной диффузионной ячейке. Получены данные по эффективным коэффициентам диффузии в пористом сорбенте и в обводненной пасте ГАП. Рассчитаны пробеги альфа-частиц от сорбированных радионуклидов с учетом всех дочерних продуктов. Далее будет рассчитана мощность поглощенной дозы, создаваемая такими РФП, в зависимости от времени сорбции и размера частиц, что необходимо для их применения в терапии онкологических заболеваний.

УДК 544.252.4

МОЛЕКУЛЯРНО-ОРГАНИЗОВАННЫЕ СРЕДЫ ДЛЯ СОЛЮБИЛИЗАЦИИ ЛЮМИНЕСЦЕНТНОГО КОМПЛЕКСА β -ДИКЕТОНАТА ЕВРОПИЯ¹

Селиванова Н.М., Зими́на М.В., Галяметдинов Ю.Г.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет
420015, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68
e-mail: marina-ls@list.ru*

На сегодняшний день комплексы β -дикетоната европия (III), ввиду своих уникальных оптических характеристик, широко используются как материалы для плоских дисплеев, люминесцентных зондов, УФ-датчиков и электролюминесцентных устройств. Такие комплексы имеют высокий квантовый выход при узкополосном излучении и высокую чистоту цвета. Однако комплексы β -дикетонатов имеют низкую устойчивость при высоких температурах и УФ-облучении, склонны к концентрационному эффекту самогашения, что обуславливает необходимость разработки подходов создания стабильных люминесцентных сред. Среди органических растворителей ионные жидкости являются оптимальными средами для изучения люминесцентных свойств и стабильности комплексов. Исследования показали повышенную интенсивность излучения и стабильность комплексов β -дикетонатов европия после растворения их в ионной жидкости типа имидазолия. В данной работе предложен способ создания эффективных люминесцентных сред путем инкорпорирования разнолигандного комплекса европия $[\text{Eu}(\text{TGA})_4(\text{Phen})]$ в структуру лиотропной мезофазы на основе неионного сурфактанта Pluronic P123 посредством использования ионной жидкости: 1-бутил-3-метилимидазолия тетрафторбората ($[\text{BMIm}][\text{BF}_4]$). Отработана методика получения стабильных гомогенных организованных сред, в которых отсутствует кристаллизация комплекса. Исследовано фазовое поведение и оптические свойства данных систем.

¹ Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 18-03-00173

УДК 6:539.2-022.532

ВЛИЯНИЕ ПРОТИВОИОНА СОЛИ МЕТАЛЛА ПРИ ХИМИЧЕСКОМ ОСАЖДЕНИИ УПОРЯДОЧЕННЫХ НАНОПОЛОС ЖЕЛЕЗА НА ПОВЕРХНОСТЬ ГРАФИТА С ПРИМЕНЕНИЕМ МИЦЕЛЛЯРНОГО ШАБЛОНА И МАГНИТНОГО ПОЛЯ

Семенов В.А.^а, Низамеев И.Р.^{а,б}, Нефедьев Е.С.^а, Кадиров М.К.^{а,б}

^а*Казанский национальный исследовательский технологический университет
420015, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68*

^б*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН
420088, г. Казань, ул. Ак. Арбузова, д. 8
e-mail: setyonovva@gmail.com*

В данной работе были изучены различия в морфологии наноструктур железа, осажденных из растворов солей с различными противоионами (NO_3^- и BF_4^-) на поверхность высокоориентированного пиролитического графита химическим восстановлением. При осаждении использовались мицеллярный шаблон цитилтриметиламмония бромид и постоянное магнитное поле. Изучение морфологии наноструктур было осуществлено полуконтактным методом атомно-силовой микроскопии.

В результате исследования обнаружено, что при использовании нитрата железа образуются упорядоченные нанополосы следующих размеров: ширина – 28-34 нм, высота – 3-5 нм, период повторения – 29-36 нм. При использовании тетрафторбората железа никакого упорядочения в осаждаемых структурах не наблюдается.

УДК 544.7

РАСТЕКАНИЕ КАПЕЛЬ ЭПОКСИДНЫХ ОЛИГОМЕРОВ В ПРОЦЕССЕ ИХ ОТВЕРЖДЕНИЯ¹

Степаненко В.Ю., Будылин Н.Ю., Чалых А.Е.

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4
e-mail: Aniko7@list.ru*

Цель работы – изучение кинетики растекания капель эпоксидных связующих по низко- и высокоэнергетическим подложкам в процессе их отверждения.

В качестве объектов исследования были использованы эпоксидные связующие на основе ЭД-20 с отвердителями ДЭТА и ТЭТА. В качестве подложек использовали низкоэнергетическую поверхность фторопласта и высокоэнергетическую – стекла. Все измерения проводили на установке KRUSS EasyDrop при комнатной температуре.

Показано, что начальные краевые углы смачивания чувствительны к составу композиций, поверхностным характеристикам отвердителя и природе поверхности. Капли исследованных связующих на поверхности фторопласта достаточно быстро формируют краевой угол смачивания 78° и практически не меняют его в процессе отверждения.

На поверхности стекла растекание капель связующих в процессе отверждения происходит до точки гелеобразования на фоне непрерывного нарастания вязкости. Краевой угол смачивания непрерывно изменяется, что связано, по нашему мнению, с миграцией поверхностно-активных отвердителей в точку трехфазного контакта. После отверждения, которое было идентифицировано по результатам реологических измерений, краевой угол смачивания фиксируется и не изменяется в дальнейшем ни при каких условиях.

¹ Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 17-03-00197, и в рамках Госзадания, регистрационный номер АААА-А18-118030690046-0

УДК 544.7

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ АКРИЛОВЫХ ПОЛИМЕРОВ¹

Суровяткина Е.В.^а, Степаненко В.Ю.^а, Чалых А.Е.^а, Ключин Е.С.^б

^а*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4*

^б*Научно-исследовательский институт химии и технологии полимеров им. Ак. В.А. Каргина
606000, г. Дзержинск Нижегородской области, Восточный промрайон,
Автозаводское шоссе, д. 11
e-mail: surovyatkinaev@gmail.com*

Цель работы – определение энергетических характеристик поверхности акриловых гомополимеров и сополимеров. В качестве объектов исследования были использованы полибутилакрилат, полиэтилакрилат, полиметилакрилат, поли-2-этилгексилакрилат и их сополимеры с винилацетатом.

Измерения проводили на пленках, полученных методом полива на подложку из полиэтилентерефталата. Показатели преломления n_D в интервале температур 20-120 °С определяли на рефрактометре ATAGO NAR-2T (Japan), Поверхностную энергию пленок акриловых полимеров определяли методом сидячей капли тестовыми жидкостями. В качестве последних использовали воду, диметилсульфоксид, трикрезилфосфат, глицерин. Измерения проводили на установке KRUSS EasyDrop при комнатной температуре. Расчет поверхностной энергии, ее полярной и дисперсионной составляющих проводили в рамках подхода Оуэнса-Вендта.

Получены температурные зависимости показателя преломления, по которым в рамках уравнения Лифшица рассчитаны теоретические значения дисперсионной составляющей поверхностной энергии акрилатов. Результаты расчетов сопоставлены с данными прямых измерений по значениям поверхностной энергии акрилатов. Показано, что энергетические характеристики, полученные в экспериментах, по показателю преломления и поверхностной энергии находятся в количественном согласии.

¹ Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 17-03-00197, и в рамках Госзадания, регистрационный номер АААА-А18-118030690046-0

УДК 66.095.26

ПЕРЕДАЧА ЦЕПИ НА ПОЛИМЕР ПРИ АНИОННОЙ (СО)ПОЛИМЕРИЗАЦИИ АКРИЛОНИТРИЛА¹

Тарасов А.Е., Грищук А.А., Бадамшина Э.Р.

*Институт проблем химической физики РАН
142432, г. Черноголовка, пр. Ак. Семенова, д. 1
e-mail: atarasov@icp.ac.ru*

Одной из важнейших областей применения полиакрилонитрила и его сополимеров с кислородсодержащими мономерами (ПАН), синтезируемых в промышленности методами радикальной полимеризации, является получение углеволокна (УВ) в процессе термообработки "белого" ПАН-волокна. В настоящее время остро стоит проблема разработки новых перспективных способов получения ПАН. Нами предложены новые иницирующие системы для анионной (со)полимеризации акрилонитрила (АН) на основе бициклических диаминов и оксидов низших олефинов, не содержащие в своем составе никаких элементов, которые могут отрицательно влиять на свойства УВ. Однако анионная (со)полимеризация АН сопровождается протеканием внутри и межмолекулярной передачи цепи на полимер, что приводит к образованию разветвленных продуктов.

Работа посвящена исследованию указанных побочных реакций. Показано, что увеличение концентрации иницирующей системы этиленоксид (ЭО)/1,4-диазабицикло[2.2.2]октан (ДАБКО), а также повышение содержания оксида низшего олефина (этиленоксида, ЭО) в ее составе, приводит к интенсификации реакций передачи цепи на полимер. Высказано предположение, что ЭО в этом случае выступает в роли передатчика цепи. Показано, что с понижением температуры полимеризации с 20 до 0°С интенсивность протекания передачи цепи на полимер снижается незначительно.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-03-00612-а

УДК 535.378

ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ИЗЛУЧАЮЩЕЙ СРЕДЫ ПРИ ТРИБОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ КРИСТАЛЛОВ СОЛЕЙ ЛАНТАНИДОВ В АТМОСФЕРЕ АЦЕТИЛЕНА¹

Тухбатуллин А.А.^а, Галина А.А.^б, Гайсина А.Р.^а, Абдрахманов А.М.^а, Герасимов Д.Н.^в, Шарипов Г.Л.^а

^аИнститут нефтехимии и катализа РАН
450075, г. Уфа, пр. Октября, д. 141

^бБашкирский государственный университет
450076, г. Уфа, ул. Заки Валиди, д. 32

^вНациональный исследовательский университет «МЭИ»
111250, Россия, г. Москва, Красноказарменная улица, д. 14
e-mail: adis0501@mail.ru

Недавно было показано, что во время триболюминесценции (ТЛ, свечение кристаллофосфора при разрушении) солей лантанидов в атмосфере C_2H_2 в спектре в составе газовой компоненты ТЛ регистрируются светоизлучающий продукт механохимического разложения ацетиленов – $*C_2$ радикал [1]. С учетом этих результатов в настоящей работе по полученным экспериментальным спектрам полос $*C_2$ радикала проведены расчеты и определены температуры излучающей среды в атмосфере ацетиленов при ТЛ. Рассчитанные для ацетиленов колебательные температуры $T_{vib} \sim 4600$ К превышают вращательные $T_{rot} < 2500$ К. Это указывает на то, что рабочая среда представляет собой неравновесную плазму, в которой возбуждение $*C_2$ происходит в результате электронного удара. Кроме того, например для двух экспериментов по ТЛ в атмосфере C_2H_2 получены значения: $T_{vib} \sim 3700$ К и ~ 3800 К, в то время как для: $T_{rot} \sim 600$ К и ~ 2200 К (отметим, что результаты получены в непрерывной серии (35 мин) экспериментов, время регистрации одного спектра 3.5 минут). Это может свидетельствовать о том, что в серии последовательных экспериментов возможно возбуждение и за счет столкновения с тяжелыми частицами, например молекулами горячего газа как следствие его нагрева.

Литература

1. Tukhbatullin A.A., Sharipov G.L., Bagautdinova A.R. Journal of Luminescence, 2016. V. 173. P. 127.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Республики Башкортостан, научный проект № 17-42-020200

УДК 544.18

ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ИСХОДНЫХ ИЗОМЕРОВ МОЛЕКУЛЫ C₉₀

Туктамышева Р.А.^а, Хаматгалимов А.Р.^б, Коваленко В.И.^б

^а*Казанский авиационно-технический колледж им. П.В Дементьева
420036, г. Казань, ул. Копылова, д. 2б*

^б*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН
420088, г. Казань, ул. Ак. Арбузова, д. 8
e-mail: regina_88_86@mail.ru, koval@iopc.ru*

Очевидным фактором, определяющим селективность и последовательность радикального присоединения, является распределение электронной плотности фуллеренового каркаса. Пирамидальность рассматривается нами как «выход» углеродного атома из плоскости. Так, в графите и графене все атомы углерода лежат в плоскости и каждый из них лежит в узле трех гексагонов, каждый гексагон имеет валентный угол 120° и, соответственно, сумма валентных углов при данном атоме равна 360°. Молекула фуллерена имеет сферический каркас. Так, в фуллерене C₆₀ сумма валентных углов любого атома углерода равна 348°, что указывает на отклонение от плоскости на 12°. Поскольку фуллерен C₆₀ является самым стабильным, это отклонение принимается за норму. Если же сумма валентных углов существенно ниже (пирамидальность выше), то полагают, что данный атом углерода может быть более реакционноспособным, чем атомы с более низкой пирамидальностью.

Нами были проанализированы геометрические параметры – длины связей и суммы валентных углов при атомах углерода в молекулах следующих изомеров: 46(C_{2v}), 35(C_s), 30(C₁), 28(C₂), 32(C₁) и 34(C_s). Получены максимальные, минимальные значения суммы валентных углов углеродных атомов, а также интервал, по которому происходило присоединение аддендов, соответствующий экспериментальным данным. Таким образом, нами впервые показано, что наиболее важным параметром, влияющим на картину расположения аддендов в реакции радикального присоединения к фуллерену C₉₀, является электронная структура молекул исходного фуллерена.

ОТРИЦАТЕЛЬНЫЕ ИОНЫ ПРОИЗВОДНЫХ ПОРФИРИНА И ИХ АНАЛОГОВ¹

Туктаров Р.Ф.^a, Муфтахов М.В.^a, Хатымов Р.В.^a, Райтман О.А.^b,
Панкратьев Е.Ю.^a

*^aИнститут физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН
450075, г. Уфа, пр. Октября, д. 71*

*^bИнститут физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4
e-mail: renatuk@anrb.ru*

Гемоглобин и хлорофилл, играющие важнейшую роль в транспорте кислорода в живых организмах и процессе фотосинтеза в растениях, представляют собой производные порфиринов. Благодаря уникальному набору физических и химических свойств порфирины и их аналоги привлекают большой интерес исследователей в области химии, биологии, медицины, оптики, электроники. Неудивительно, что в результате длительной эволюции природа остановила свой выбор именно на этих объектах.

Производные порфиринов и их аналоги – фталоцианины исследованы методом масс-спектрометрии резонансного захвата электронов (МС РЗЭ). Кроме традиционных кривых зависимости эффективного выхода отрицательных ионов от энергии электронов (КЭВ ОИ), были получены данные по временам жизни (τ_a) молекулярных ОИ относительно автоотщепления. Оказалось, что τ_a для этих объектов достигает миллисекундного диапазона, что на несколько порядков превышает таковые для большинства органических молекул. Величина τ_a зависит от размера молекул, их геометрии, электронной структуры. В то же время, от этих же молекулярных параметров зависит адиабатическое электронное сродство (ЕА). Анализ полученных данных позволяет прийти к логическому заключению о непосредственной связи τ_a с ЕА: чем выше ЕА молекулы, тем стабильнее молекулярный ОИ, значит, тем дольше молекула может удерживать дополнительный электрон, и, соответственно выше τ_a . Из предыдущих экспериментов с полициклическими ароматическими углеводородами установлено, что с заменой в структуре молекул одного или нескольких атомов углерода на атом

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 17-42-020643

азота значительно увеличивается τ_a ОИ, вероятно, из-за большей величины ЕА таких азапроизводных молекул.

Исследования процессов образования и распада ОИ разнообразных производных порфирина и его аналогов необходимы для выбора наилучших кандидатов для оптоэлектронных устройств – солнечных элементов и средств отображения информации.

УДК 541.64:544.723

ИЗУЧЕНИЕ СОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ КРИОГЕЛЕЙ ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА И ХИТОЗАНА¹

Ульябаева Г.Р., Губочкина А.А., Кильдеева Н.Р.

*Российский государственный университет им. А.Н. Косыгина
117997, г. Москва, ул. Садовническая, д. 33, стр. 1
e-mail: gulnaz_ulyabaeva@mail.ru*

Криогели поливинилового спирта (КГ ПВС) – широкопористые, высоконабухающие полимерные студни, получаемые путем замораживания – оттаивания, когда замороженный растворитель выполняет роль порогена. Система сообщающихся пор таких материалов позволяют использовать их в медицине, биоинженерии и при разработке новых сорбционных материалов и систем с контролируемым выделением лекарственных веществ.

В представленной работе были исследованы комплексные криогели из водных растворов смесей ПВС и хлоргидрата хитозана (ХГХ). Последующая щелочная обработка приводила к превращению водорастворимого ХГХ в нерастворимую форму хитозана-основания (ХТО), который был включен в систему как дисперсный наполнитель в виде частиц диаметром 2-5 мкм и пораами порядка 10-50 мкм. Такая операция приводит к значительному увеличению жесткости и теплостойкости получаемых композитных криогелей.

Наличие неподеленной электронной пары азота аминогруппы хитозана придает этому полимеру свойства полилиганда при сорбции ионов тяжелых металлов и ряда органических соединений, таких как красители. Показано, что степень извлечения композитных КГ ПВС-ХТО при сорбции из разбавленных растворов CuSO_4 и текстильных красителей достигает до 90-98%. Дополнительная сшивка полученных материалов позволила получить сорбенты из КГ ПВС-ХТО многократного использования.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-33-00324

УДК 541.18

ГИДРОТЕРМАЛЬНЫЙ СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ ХИТОЗАНА

Урюпина О.Я.^а, Уродкова Е.К.^{а,б}, Жаворонок Е.С.^б, Сенчихин И.Н.^а

^а*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4*

^б*Московский технологический университет
119571, г. Москва, пр. Вернадского, д. 86
e-mail: isenchikhin.ras@gmail.com*

Интерес к полимерным композитам на основе хитозана (ХТЗ) сохраняется на протяжении нескольких десятилетий. Этот природный полисахарид обладает уникальным комплексом физических, химических и фармакологических свойств, нетоксичен, биосовместим и способен к биодеструкции. Большой интерес вызывает применение ХТЗ и родственного ему карбоксиметилхитина в качестве среды для синтеза наночастиц (НЧ) серебра и золота. В большинстве этих работ синтез НЧ металла проводится в обращенных мицеллах, в том числе в присутствии дополнительных восстановителей и стабилизаторов, или с применением радиационного облучения, что усложняет процесс получения частиц. В связи с этим цель нашего исследования заключалась в разработке более простого метода синтеза, исключающего создание сложных многофазных систем.

Нами разработан простой, одностадийный метод синтеза монодисперсных наночастиц серебра в водном растворе ХТЗ. Отмечено, что звено ХТЗ, представляющее собой β -D-глюкозу, может выполнять функцию не только стабилизатора наночастиц, но и их восстановителя. В работе были подобраны температурный режим, время реакции и pH среды, при которых формируются монодисперсные НЧ серебра со средним диаметром 65 нм, имеющие, в перспективе, медицинское применение. Для определения характера взаимодействия ХТЗ с прекурсором в условиях данного синтеза были проведены спектральные исследования. Установлено, что в процессе восстановления ионов серебра и стабилизации образующихся наночастиц участвуют не только свободные NH_2 группы, но и гидроксильные группы структурного звена хитозана.

УДК 541.64

ИССЛЕДОВАНИЕ НАДМОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ АМФИФИЛЬНЫХ БЛОК-СОПОЛИМЕРОВ НА ОСНОВЕ 2,4- ТОЛУИЛЕНДИИЗОЦИОНАТА И МАКРОИНИЦИАТОРА С РАЗЛИЧНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ КОНЦЕВЫХ ОКСИЭТИЛЕНОВЫХ ЗВЕНЬЕВ

Файзулина З.З., Джаббаров И.М., Шамсутдинова Р.А., Калдарь Ю.Р.,
Дулмаев С.Э., Давлетбаева И.М.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет
420015, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68
e-mail: faizulina.alin@yandex.ru*

Целью данной работы является изучение влияния содержания концевых оксиэтиленовых звеньев в составе ППЭГ и реакционных условий на особенности порообразования путем исследования сорбционной активности и поверхностных свойств мезопористых полимеров, получаемых на их основе.

Путем измерений водопоглощения, краевого угла смачивания водой, толуолом и эффективности сорбции родамина 6G исследованы серии пленочных пористых полимерных материалов, полученных путем полиприсоединения 2,4-толуилендиизоцианата (ТДИ) к макроинициаторам анионной природы, представляющим собой блок-сополимеры оксида пропилена и оксида этилена (ППЭГ с $M_n = 4200$) с содержанием концевых полиоксиэтиленовых (ПОЭ) составляющих 15%, 20%, 30% и 40%, часть гидроксильных групп которого замещена на калий-алкоголятные.

Установлено, что увеличение количества оксиэтиленовой составляющей в составе макроинициатора приводит к росту гидрофильности поверхности получаемых полимеров и уменьшению их свободного объема. Показано, что использование сокатализаторов также оказывает значительное влияние на особенности порообразования и увеличения эффективности сорбции Родамина 6G исследуемыми полимерами.

ПЕРВАПОРАЦИОННЫЕ МЕМБРАНЫ ДЛЯ АБСЛЮТИЗАЦИИ СПИРТОВ¹

Файков И.И., Нестерова В.П., Пулялина А.Ю.

Санкт-Петербургский государственный университет
199034, г. Санкт-Петербург, Университетская набережная, д. 7/9
e-mail: ifaykov@gmail.com

Первапорация является одним из перспективных мембранных методов разделения, концентрирования и очистки жидких сред ввиду малой энергоемкости и безотходности производства, а также компактности оборудования. Важнейшим преимуществом данного метода является возможность разделения азеотропных, близкикопящих и термически неустойчивых смесей.

Целью данной работы является исследование физико-химических свойств и транспортных характеристик новых мембран на основе гетероароматических полимеров в процессах абсолютизации спиртов путем первапорации (рис. 1).

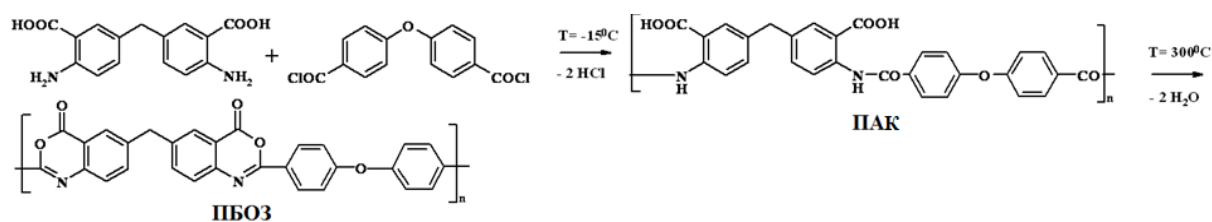


Рис. 1. Схема превращения ПАК в ПБОЗ

Дегидратация органических растворителей является одним из наиболее развиваемых направлений в области первапорации. Применение спиртов перспективно в качестве альтернативного источника энергии, а также при улучшении экологических характеристик топлива.

В ходе работы были проведены эксперименты по первапорации смесей вода-н-бутанол и вода-н-пропанол в широком диапазоне концентраций. Для изучения массопереноса был проведен детальный анализ сорбционных и диффузионных параметров мембран. Показано, что разработанные мембраны позволяют эффективно очищать спирты энерго- и ресурсосберегающим мембранным методом.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, грант № 16-13-10164

УДК 662.8

КОМПОЗИЦИОННЫЕ ВЫСОКОНАПОЛНЕННЫЕ СОСТАВЫ С ПОЛИМЕРНОЙ ДИСПЕРСИОННОЙ СРЕДОЙ

Федоров Ю.И., Михайлов А.С., Ившин С.С., Гибадуллин И.З., Кравченко Э.Ф.,
Динисламова А.А.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет
420015, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68
e-mail: snchar@yandex.ru*

Композиционные высоконаполненные составы (КВС) с полимерной дисперсионной средой представляют собой системы с содержанием наполнителя 0.5-0.95 масс. долей (0.5-0.74 об. долей). Высокое содержание дисперсного наполнителя нетипично для конструкционных материалов, но КВС, при использовании смеси наполнителей различной природы представляют значительный интерес. С учетом высокой вязкости (до 2 МПа·с) и наличия предела текучести, формование подобных систем производится преимущественно двумя методами: одностороннее прессование, плунжерная экструзия. Экструзия является более предпочтительным способом изготовления элементов из КВС, так как позволяет получать изделия с высоким соотношением l/d и относительной плотностью 0.90-0.99.

Для формования качественных изделий из КВС с объемным наполнением 0.7-0.74 об. долей требуется определить оптимальные режимы формования (зависимость напряжения от скорости сдвига, противодавление, температура). Проведенные исследования показали, что наличие наполнителей с высокой удельной поверхностью в составе КВС приводит к появлению разрывов сплошности потока, трещин на поверхности, неравномерному распределению компонентов в объеме изделия даже при формфакторе капилляра $l/d = 5 \div 10$. Для решения данной проблемы предложен способ интенсификации сдвигового воздействия в процессе формования, путем многократного экструдирования. При 5-7 кратном продавливании через фильеру предложенный способ формования позволяет увеличить предел прочности сформованного элемента на 30-50%, достичь относительной плотности 0.96-0.99.

УДК 544.169+544.142.4:544.361.3

ОСОБЕННОСТИ ВОДОРОДНОГО СВЯЗЫВАНИЯ В ПРОТОННЫХ ИОННЫХ ЖИДКОСТЯХ НА ОСНОВЕ ТРЕТИЧНОГО КАТИОНА¹Федорова И.В., Сафонова Л.П.

*Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН
153045, г. Иваново, ул. Академическая, д. 1
e-mail: fiv@isc-ras.ru*

Протонные ионные жидкости (ПИЖ) являются одним из подклассов ИЖ и менее изучены. Несмотря на их чистый ионный состав, Н-связи являются отличительной чертой ПИЖ и во многом обуславливают их физико-химические свойства. Объектами изучения явились ПИЖ на основе триэтил- (ТЕА) и триэтанол- (ТЕОА) амина и фосфористой кислоты. Посредством квантово-химического расчета методом B3LYP-GD3/6-31++G(d,p) показано, что оба амина, взаимодействуя с кислотой, способны образовывать только ионные пары $\text{АН} + \text{В} \rightarrow \text{А}^- \dots \text{ВН}^+$, в которых катион и анион прочно удерживаются между собой за счет электростатического взаимодействия и образования Н-связи. Установлено, что ионная пара ТЕОА/ H_2PO_3 является энергетически более стабильной, чем ионная пара с катионом ТЕА, что коррелирует с экспериментальными данными о термической стабильности этих ИЖ. Причиной этого служит наличие дополнительных Н-связей за счет ОН групп катиона ТЕОА и атомов кислорода дигидрофосфит аниона. Анализ характеристик критических точек водородной связи (AIM анализ) и энергий орбитальных взаимодействий (NBO метод) показал, что наиболее прочная N-H...O Н-связь наблюдается в ТЕА/ H_2PO_3 . Для ТЕОА/ H_2PO_3 связь N-H...O сильнее, чем связи O-H...O. Изучено влияние среды на стабильность ионных структур, полученных в газовой фазе в рамках континуальной модели С-PCM.

¹ Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ и Ивановской области, научный проект № 18-43-370009

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА ДЛЯ РАЗВИТИЯ КВАНТОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ¹

Фельдман Э.Б.

*Институт проблем химической физики РАН
142432, г. Черноголовка, пр. Ак. Семенова, д. 1*

Разработка квантовых компьютеров, развитие квантовой криптографии, передача квантовых состояний, телепортация, квантовая метрология и т.д. достигли значительных успехов и привели к созданию квантовых приборов и устройств, значительно превосходящих по своим возможностям классические аналоги [1]. Физические основы квантовых технологий связаны с использованием суперпозиционных квантовых состояний и явления запутанности [2]. Методы магнитного резонанса, в частности, ЯМР дают уникальные возможности для теоретического и экспериментального исследования основных концепций квантовой информатики (запутанности, квантового дискорда, декогеренции и т.д.) [3]. Это прежде всего связано с развитыми экспериментальными методами создания многокубитных когерентных состояний и управления ими. Важную роль играет сильная изолированность систем ядерных спинов от других степеней свободы, что обеспечивает большие времена жизни создаваемых суперпозиционных состояний, которые могут использоваться и для проведения квантовых вычислений. Удобный и относительно простой теоретический аппарат позволяет получать аналитические результаты для информационных характеристик, что невозможно достичь в рамках других методов.

Мы сосредоточены на исследовании квантовых корреляций в простых системах взаимодействующих ядерных спинов [4] методами ЯМР и многоквантового ЯМР. Квантовые корреляции ответственны за преимущества квантовых приборов и устройств по сравнению с их классическими аналогами. Их исследование позволяет изучить свойства квантовых корреляций и разработать методы управления ими.

Изучение декогеренции позволяет найти времена жизни создаваемых многокубитных коррелированных кластеров, что важно для возможности

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 16-03-00056

реализации квантовых алгоритмов.

Исследование декогеренции многокубитных коррелированных кластеров мы проводим как теоретически, так и экспериментально. Основой для исследования декогеренции служит дипольная релаксация многоквантовой (МК) когерентности ЯМР второго порядка. С этой целью нами разработаны методы динамики и релаксации дипольно связанных ядерных спинов в МК экспериментах ЯМР [5]. Рассматривая дипольную релаксацию МК когерентностей ЯМР в МК эксперименте ЯМР, мы исследовали зависимость скорости декогеренции от размера многоспинового кластера. В МК экспериментах ЯМР, проведенных на монокристалле фтористого апатита кальция, мы показали, что скорость декогеренции медленно меняется с ростом размера кластера и установили верхний предел для этой скорости в рассмотренной системе.

Литература

1. Preskill J. Quantum computing in the NISQ era and beyond. arHiv:1801.00862, quant-phys., 2018.
2. Nielsen M.A., Chuang I.L. Quantum Calculation and Quantum Information. University Press. Cambridge, 2000.
3. Aldoshin S.M., Feldman E.B., Yurishchev M.A. Quantum entanglement and quantum discord in magnetoactive materials. Low Temperature Physics, 2014. 40. 3. P. 5-21.
4. Feldman E.B., Pyrkov A.N., Zenchuk A.I. Solid-state multiple quantum NMR in quantum information processing: exactly solvable models. Philosophical Transactions of the Royal Society A, 2012. 370. P. 4690-4712.
5. Bochkin G.A., Feldman E.B., Vasilev S.G., Volkov V.I. Dipolar relaxation of multiple quantum coherences in one-dimensional systems. Chemical Physics Letters, 2017. 680. P. 56-60.

УДК 539.143.4

РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ В МЕДЬ-КИСЛОРОДНОЙ ПЛОСКОСТИ В СИСТЕМЕ La_2CuO_4

Фролов А.С., Давлитова Г.Д., Галиазметов В.Д., Погорельцев А.И.,
Матухин В.Л.

*Казанский государственный энергетический университет
420066, г. Казань, ул. Красносельская, д. 51
e-mail: darkmay34@gmail.com*

Изучение спектров ЯКР ядер ^{139}La показало, что в купрате лантана при не слишком высоких температурах проявляются антиферромагнитные свойства, характеризуемые внутренним магнитным полем $H = 1000$ Э, исчезающим с повышением температуры ($T > T_N$).

В настоящей работе полученные из экспериментов ЯКР в системе La_2CuO_4 квадрупольные частоты были использованы для исследования особенностей распределения электронной плотности (ЭП) в определяющей медь-кислородной плоскости в немагнитной фазе данного соединения – использовалась экспериментально полученная частота перехода $5/2-3/2$ для температуры 270 К (при $T_N \sim 250$ К). Были проведены построения карт распределения электронной плотности (ЭП) в рамках теории Бейдера, лапласиана ЭП, функции локализации электронов (ELF), локализованного орбитального локатора (LOL). Выполнен предварительный анализ топологии распределения электронной плотности.

Исследование медь – кислородная плоскости выявило наличие общей для всех атомов плоскости изолинии электронной плотности (см. рисунок) на уровне 0.08 $e/\text{Å}^3$. Можно предположить наличие заметного количества обобщенных электронов в межатомных областях. При этом величины ELF и LOL также несколько увеличиваются (~ 0.350). Была также рассчитано значение щели LUMO-HOMO, которое составляет величину $\Delta \sim 5.93$ eV, что типично для диэлектрика. В настоящее время аналогичные исследования проводятся для антиферромагнитной области ($T < 250$ К) и области непосредственно фазового перехода ($T \sim 250$ К).

УДК 661.728

СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ МОДИФИЦИРОВАННОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ ВОЛОКОН РАЗЛИЧНОЙ ПРИРОДЫ

Хакимянова Р.И.^а, Валишина З.Т.^а, Городнев И.О.^б, Голубев А.Е.^б,
Косточко А.В.^а

^а*Казанский национальный исследовательский технологический университет
420015, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68*

^б*Научно-исследовательский институт полимерных материалов
614113, г. Пермь, ул. Чистопольская, д. 16
e-mail: razina.khachimzyanova@yandex.ru*

Актуальной является исследование структурных особенностей модифицированной целлюлозы из различного вида волокна (лен, конопля) в сравнении со свойствами гидролизованной хлопковой целлюлозы с вязкостью 8-10 мПа·с, рассматриваемой в качестве перспективного альтернативного вида сырья для химической переработки.

Особенности структуры травянистой целлюлозы (изо льна, конопли) в отличие от хлопковой целлюлозы (ХЦ) зависят от морфологии волокна, условий произрастания и переработки, химического состава, распределения спутников целлюлозы в клеточной стенке, характера расположения в волокне кристаллитов.

В литературе имеются ограниченные количественные сведения по изменению структуры целлюлозного материала в процессе кислотного гидролиза в среде водных слабых кислот (HNO_3 , H_2SO_4). Исследование молекулярной, надмолекулярной структуры гидролизованной целлюлозы из различного вида волокна в сравнении с особенностями структурной организации хлопковой целлюлозы необходимо для расширения представлений о строении целлюлозы, ее структуре, влиянии параметров структуры целлюлоз на их свойства и свойства азотнокислых эфиров целлюлозы. Проведены комплексные исследования свойств модифицированной целлюлозы с применением метода ИК-Фурье спектроскопии, рентгеноструктурного анализа, методов вискозиметрии, электронной микроскопии и др.

УДК 678

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОТВЕРЖДЕНИЯ ЭПОКСИАНГИДРИДНОГО СВЯЗУЮЩЕГО С ФОСФОНИЕВЫМ КАТАЛИЗАТОРОМ В ИЗДЕЛИИ ИЗ УГЛЕПЛАСТИКА¹

Хамидуллин О.Л., Мадиярова Г.М., Амирова Л.М.

*Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева
420111, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 10
e-mail: KhamidullinOskarL@mail.ru*

Композиционные материалы с матрицей на основе эпоксидных смол, отвержденных ангидридами ди- и поликарбоновых кислот, обладают высоким уровнем физико-механических, электротехнических характеристик, высокой хим- и водостойкостью. Низкая вязкость эпоксиангидридных композиций обуславливает возможность их применения при формовании изделий из композиционных материалов методами инфузии и RTM.

Отсутствие химического взаимодействия фосфониевого катализатора со смолой и отвердителем при температурах до 160°C приводит к большей жизнеспособности систем с фосфониевой солью по сравнению с системами с имидазолом. На основе кинетических моделей, полученных с использованием программы Thermokinetics3, оптимизирован режим отверждения связующих с различной концентрацией фосфониевого катализатора. Моделирование пропитки штанги космической конструкции проводилось с учетом изменения вязкости связующего при температурах инъекции. В результате установлено, что жизнеспособность эпоксиангидридного связующего с концентрацией катализатора от 0.25 до 2% позволяет провести полную пропитку изделия без риска преждевременного гелеобразования. Режим формования корректировался на основе конечно-элементной модели для снижения величины перегрева вызванного экзотермической реакцией отверждения.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России, уникальный идентификатор проекта RFMEFI57717X0262

УДК 539.196

ДИССОЦИАЦИЯ ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ИОНОВ ТЕТРАЦИАНОХИНОДИМЕТАНА (TCNQ) НА ПОВЕРХНОСТИ КАМЕРЫ ИОНИЗАЦИИ ПРИ РЕЗОНАНСНОМ ЗАХВАТЕ МЕДЛЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ¹

Хатымова Л.З., Лукин В.Г., Хвостенко О.Г.

*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН
450075, г. Уфа, пр. Октября, д. 71
e-mail: lesya0706@ya.ru*

Изучены процессы диссоциации отрицательных молекулярных ионов (M^-) TCNQ на поверхности камеры ионизации (КИ), образующиеся первоначально по резонансному механизму при тепловых энергиях электронов, захваченных молекулами. Предполагается, что на поверхности диссоциируют ионы M^- TCNQ, которые после своего образования в газовой фазе достигают стенок КИ благодаря достаточно большому времени жизни относительно автоотщепления добавочного электрона и адсорбируются там. Диссоциация на поверхности происходит при малой энергии захваченных электронов, которой было бы недостаточно для диссоциации в газовой фазе. На поверхности распад ионов M^- TCNQ происходит за счет воздействия поверхности на молекулярный ион, которое выражается в сдвиге энергетического баланса диссоциации до необходимого предела. Полученные данные необходимы при решении проблем, связанных со стабильностью материалов на основе TCNQ при их взаимодействии с поверхностью подложки в различных устройствах молекулярной электроники.

¹ Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ и Республики Башкортостан, научный проект № 17-42-020643

УДК 539.19

**МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ
ОБРАЗОВАНИЯ И РАСПАДА ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ИОНОВ¹**Хатымов Р.В., Щукин П.В., Муфтахов М.В.*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН
450075, г. Уфа, пр. Октября, д. 71
e-mail: Rustem@anrb.ru*

Физико-химические процессы в газах и конденсированных средах часто сопровождаются высвобождением и/или переносом электронов от одних многоатомных частиц к другим. Низкоэнергетические электроны могут присоединяться к молекулам, образуя временноживущие (метастабильные) молекулярные отрицательные ионы (ОИ). В отличие от порогового процесса образования положительных ионов при электронной ионизации, захват свободных электронов изолированными молекулами происходит только при совпадении кинетической энергии электронов с дискретными энергетическими уровнями в электронной структуре молекул (орбиталями, или переходами между ними). Это обуславливает специфический резонансный вид кривых эффективного выхода ОИ, индивидуальный для каждого соединения. Дальнейшая эволюция молекулярных ОИ сводится к спонтанному выбросу добавочного электрона либо к диссоциативному распаду с образованием определенного сочетания отрицательно заряженных фрагментов и нейтральных контр-частиц. Эти базовые принципы стали основой метода масс-спектрометрии отрицательных ионов резонансного захвата электронов, разработанного и развиваемого в академических институтах Уфы. В докладе представлены исследования энергетики, кинетики, спектральных и других особенностей образования и распада ОИ соединений из различных классов, позволяющие делать выводы о механизмах химических реакций, процессов в биологических средах, о пригодности тех или иных видов молекул для использования в материалах органической электроники и фотоники, и др.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты №№ 17-42-020643р_а и 16-08-00384

УДК 544.72:541.183+547.288

ТЕНЗИОМЕТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ ОКСИМОВ НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА ЖИДКОСТЬ-ГАЗ

Хилько С.Л., Котенко А.А., Гребенюк С.А., Заречная О.М., Михайлов В.А.

*Институт физико-органической химии и углехимии
83114, г. Донецк, ул. Розы Люксембург, д. 70
e-mail: sv-hilko@yandex.ru*

Методами кольца Дю Нуи, формы висячей капли и максимального давления в пузырьке исследованы тензиометрические и реологические характеристики растворов дикатионного (дихлорид 1,3-бис(3'-цетилимидазолий-1'-ил)-2-оксиминопропана) и монокатионного (хлорид 1-(2'-оксиминопропил)-3-цетилимидазолия) оксимов на границе раздела жидкость – газ. Выявлена высокая поверхностная активность и высокие значения модулей вязкоупругости и упругости дикатионного оксима.

Методами ЯМР (BRUKER Avance II 400, 9.4 Тл) ^1H , ^{13}C , 2D изучено строение модельного дикатионного оксима 1,3-бис(3'-метилимидазолий-1'-ил)-2-оксиминопропана, в котором CH_3 -группы имитируют начало боковых $\text{C}_{16}\text{H}_{33}$ -цепей, в растворе D_2O . Выявлена магнитная неэквивалентность ядер водорода и углерода в имидазолийсодержащих фрагментах. Предложена модель преимущественной конформации дикатиона оксима. Квантово-химические расчеты структуры модельных оксимов, выполненные на уровне теории $w\text{B97xD/6-31+G(d,p)}$ в состоянии идеального газа и стандартных условиях с использованием программы GAMESS(US), согласуются с данными ЯМР исследований.

На основании проведенных исследований предположено, что молекулы дикатионного оксима в силу жесткости конструкции мостикового фрагмента и развернутым углам между алкильными цепями, способны к образованию сетки межмолекулярных зацеплений, которая определяет аномально высокие значения модулей вязкоупругости и упругости поверхностных слоев и низкие значения критической концентрации мицеллообразования.

УДК 543.429.23:678

ЯМР-РЕЛАКСАЦИЯ В ИЗУЧЕНИИ СТРУКТУРЫ ПОЛИМЕРОВ**Целищева Л.В.^а, Грунин Л.Ю.^б***^аПоволжский государственный технологический университет**424000, г. Йошкар-Ола, пл. Ленина, д. 3**e-mail: CelishhevaLV@volgatech.net**^бResonance Systems GmbH**Seestrasse 28, D-73230, Kirchheim/Teck, Germany**e-mail: mobilenmr@hotmail.com*

Получение полимеров определенной структуры – одна из главных задач современной химии и физики полимерных материалов, поскольку структурой полимера определяются наиболее выгодные эксплуатационные свойства изделий.

Одним из современных направлений исследования в области физико-химии высокомолекулярных (полимерных) соединений является изучение их структурной модификации при воздействиях внешних факторов: тепла, радиации, механических нагрузок, химических реагентов и т.п. с целью придания им новых заранее заданных свойств.

Ядерная магнитная релаксация, как сравнительно новый метод физико-химических исследований уже успешно зарекомендовала себя как в рутинных промышленных измерениях, так и в научных лабораторных исследованиях.

Измерение скоростей релаксации ядерной намагниченности применяется для исследования динамики различных молекулярных процессов.

В данной работе исследовалось влияние радиационной деструкции полимеров на параметры ЯМР – релаксационных затуханий. Получено, что значения времен поперечной ЯМР-релаксации могут быть использованы при реологических измерениях для получения данных, полностью дублирующих механическую реометрию. Установлено, что скорость спин-спиновой релаксации с хорошей точностью линейно зависит от модуля упругости резины.

УДК 539.194: 535.37

МЕХАНИЗМ СПЕЦИФИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА ПОЛЯРНОГО РАСТВОРИТЕЛЯ В СПЕКТРАХ ПОГЛОЩЕНИЯ РЯДА ХИНОНОВ

Цеплин Е.Е., Цеплина С.Н., Хвостенко О.Г.

*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН
450075, г. Уфа, пр. Октября, д. 71
e-mail: tzeplin@mail.ru*

Сдвиги полос поглощения при переходе от неполярных растворителей к полярным обусловлены изменением межмолекулярного взаимодействия между молекулами растворенного вещества и молекулами растворителя, которое приводит к изменению энергетического расстояния между основным и возбужденным состояниями молекул растворенного вещества. При этом более сильное влияние на сдвиги полос оказывает образование молекулярных комплексов (специфические эффекты растворителя), и в частности – комплекса с образованием водородных связей.

На примере ряда хинонов: *para*-бензохинона, дурохинона, 1,2-нафтохинона и 5,12-тетраценхинона, показано, что при образовании водородных связей молекулы хинона с молекулами метанола происходит изменение некоторых энергетических щелей между занятыми и вакантными молекулярными орбиталями молекулы хинона, что и приводит к сдвигу соответствующих полос поглощения в полярном растворителе (метаноле) по сравнению с неполярным (гексаном). Результат получен с использованием расчетов электронных спектров методом TDDFT B3LYP/6-311+G(d,p).

УДК 539.194: 535.37

ЭЛЕКТРОННЫЕ ВОЗБУЖДЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ 3,5-ДИБРОМ-1-(ТИЕТАНИЛ-3)-1,2,4-ТРИАЗОЛА

Цеплина С.Н., Цеплин Е.Е.

Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН
450075, г. Уфа, пр. Октября, д. 71
e-mail: SN_Tseplina@mail.ru

Производные 1,2,4-триазола широко используется в медицине в качестве лекарственных препаратов для лечения грибковых и вирусных инфекций, рака, психических расстройств, заболеваний сердечнососудистой системы. В настоящее

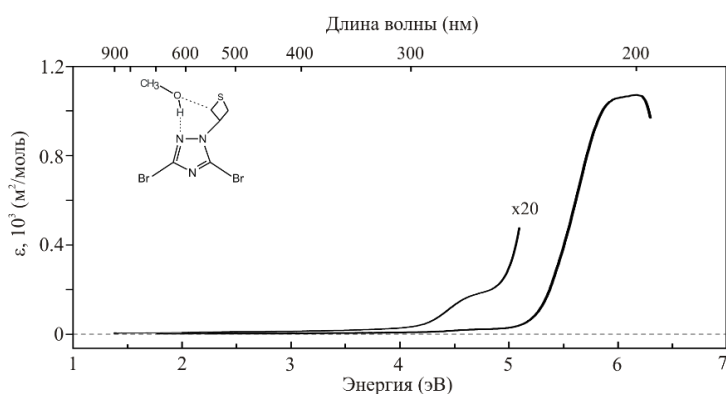


Рис. 1. Спектр поглощения 3,5-дибром-1-(тиетанил-3)-1,2,4-триазола в растворе метанола

время активно продолжается поиск новых лекарственных средств на основе 1,2,4-триазола, которые обладают высокой биологической активностью. Вместе с тем необходимо исследование их электронного строения, так как оно во многом обуславливает механизм их действия.

Получен спектр поглощения недавно синтезированного 3,5-дибром-1-(тиетанил-3)-1,2,4-триазола в растворе метанола (рис. 1). Выполнен расчет TDDFT B3LYP/6-311+G(d,p) электронного спектра водородного комплекса молекулы с молекулой метанола. На основании сопоставления данных расчета и данных спектроскопии поглощения определены энергии и электронные конфигурации электронно-возбужденных синглетных состояний.

УДК 66.071.6.081.6, 66.069.85

ВЛИЯНИЕ ОСТАТОЧНОГО РАСТВОРИТЕЛЯ И ОДНОРОДНОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ И ГАЗОТРАНСПОРТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЛЕНОК ПОЛИЭФИРИМИДОВ И ПОЛИСУЛЬФОНА

Чирков С.В.^а, Кечекьян А.С.^б, Белов Н.А.^а, Антонов С.В.^а, Алентьев А.Ю.^а

*^аИнститут нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН
119991, г. Москва, Ленинский проспект, д. 29*

*^бИнститут синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН
117393, Москва, ул. Профсоюзная, д. 70
e-mail: sm1th@ips.ac.ru*

В последние годы одним из направлений мембранного материаловедения является исследование влияния различных физико-химических воздействий на пленки промышленных полимерных материалов с целью существенного изменения их газотранспортных характеристик. В настоящей работе проведено сравнение механических и газотранспортных характеристик пленок полиэфиримидов Ultem-1000 (Ultem), ПЭИ-1 и полисульфона ПСК-1, подвергшихся механическому воздействию, представленного однородным двухосным растяжением, как в присутствии остаточного растворителя, так и отожженных. Однородная деформация отожженных пленок Ultem и ПЭИ-1 приводит к изменению характера их разрушения: от хрупкого разрушения к пластическому деформированию. Отжиг и однородная деформация пленок Ultem также вызывает уменьшение коэффициентов диффузии газов, что может объясняться увеличением плотности упаковки, или ориентированием полимерных цепей в плотной части полимерной матрицы. При отжиге и однородной деформации пленок ПСК-1 наблюдается равномерное снижение модуля упругости и увеличение степени проницаемости с ростом степени деформации.

Рост коэффициентов растворимости газов и уменьшение плотности деформированных пленок свидетельствуют об изменении распределения элементов свободного объема по размерам. Показано, что термическая и деформационная обработка аморфных полимеров является способом регулирования упорядоченности их структуры и, как следствие, способом регулирования их газотранспортных характеристик.

УДК 691.175

ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ СЕТЧАТЫХ МЕТАЛЛОПОЛИМЕРНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ В РАМКАХ НЕРАВНОВЕСНОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ¹

Шабатин А.В., Харитонова Е.В., Сенчихин И.Н.

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4
e-mail: 5dr.on5@mail.ru*

В последнее время большой интерес вызывает проблема получения металлополимерных наноконпозитов, обладающих уникальными свойствами. Пристальное внимание исследователей, в частности, привлекают материалы, содержащие наночастицы (НЧ) серебра, что обусловлено наличием у последних выраженного плазмонного резонанса в видимой области спектра. Получение наноконпозитов осложняется склонностью наночастиц к агрегации – это затрудняет их использование при создании сенсорных и оптических устройств. Одним из путей ее решения может явиться получение стабильных дисперсий НЧ серебра в трехмерных полимерных сетках, например, эпоксиаминных.

В настоящей работе на базе термодинамического подхода рассмотрено формирование пространственной сетки в эпоксиаминных композициях, содержащих НЧ серебра. Предлагается подход для определения энтропии композита, находящегося в неравновесном состоянии. В рамках обобщенной неравновесной термодинамики построены полуфеноменологическая модель для описания процессов релаксации и наноскопическая модель для описания процессов отверждения, для которой возможно рассчитать кинетические коэффициенты.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 17-08-00630 А

УДК 536.7

ТРАНСПОРТНЫЕ ПРОЦЕССЫ НА ПОВЕРХНОСТИ МЕМБРАН ДЛЯ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМ С ПОЗИЦИЙ НЕРАВНОВЕСНОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ¹

Шабатин А.В., Харитонова Т.В.

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4
e-mail: 5dr.on5@mail.ru*

Неравновесная термодинамика (НТ) зарекомендовала себя надежным инструментом для решения различных задач, связанных с рассмотрением переноса через пористые тела и мембранные системы. Одно из основных ее преимуществ состоит в сведении описания неравновесных процессов к расчету кинетических коэффициентов, что при сочетании с кинетическим уравнением Фоккера-Планка позволяет значительно расширить круг рассматриваемых задач и учитывать некоторые нелинейные эффекты, оставаясь в рамках линейного приближения НТ.

В последнее время большой интерес привлекает рассмотрение процессов переноса в асимметричных мембранах. Для решения этой задачи в случае многокомпонентной системы нами был разработан подход, сочетающий в себе методы НТ и кинетической теории. Было рассмотрено классическое уравнение Фоккера-Планка для многокомпонентной смеси, затем найдено локальное производство энтропии для стационарного состояния. Из выражения для производства энтропии при привлечении кинетического уравнения были получены уравнения обобщенной неравновесной термодинамики. Для данной системы в качестве потоков и термодинамических сил могут быть использованы не только термодинамические параметры, но и их производные, что позволило получить широко применимые феноменологические уравнения обобщенного вида. Используя их, можно получить интегральные нелинейные транспортные уравнения и наметить пути определения кинетических коэффициентов. Кроме того, рассмотрен эффект асимметрии проницаемости мембран на основе данного исследования.

¹ Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-03-00314 А

УДК 544.18; 544.163.2

ВЛИЯНИЕ АКЦЕПТОРНОЙ ГРУППЫ НА ВЕЛИЧИНУ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЕЙ ЦИС- И ТРАНС-ИЗОМЕРНЫХ ФОРМ АЗОХРОМОФОРОВ. КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ И РАСТВОРИТЕЛЕ¹

Шалин Н.И., Балакина М.Ю.

*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН
420088, г. Казань, ул. Ак. Арбузова, д. 8
e-mail: shalinnikita@mail.ru*

Азохромофоры (ААВ) традиционно используются в качестве молекулярных источников нелинейно-оптической (НЛО) активности при создании полимерных НЛО материалов. Дополнительные возможности применения азохромофоров обусловлены тем, что они могут служить для фотопереключения НЛО свойств при помещении в полимерную матрицу. Квантово-химическое прогнозирование свойств цис- и транс-изомеров азохромофоров способствует реализации этих возможностей.

Расчеты структуры и свойств азохромофоров с дициановинильной и трициановинильной акцепторными группами (ААВ-DCV и ААВ-TCV, соответственно) проведены методами MP2 и DFT (функционалы плотности ω B97X, M06-2X, CAM-B3LYP). Для учета влияния растворителя использована модель поляризуемого континуума PCM. Расчеты молекулярных поляризуемостей (α и β) проведены методом MP2 и TD-DFT с использованием базисного набора aug-cc-pVDZ'.

На основе сопоставления с данными, полученными методом MP2, показано, что M06-2X позволяет оценить значения α и β азохромофоров точнее, чем другие два функционала. Транс-изомеры характеризуются значительно большими значениями β по сравнению с цис-изомерами: для ААВ-DCV увеличение двукратное, а для ААВ-TCV – восьмикратное. Замена DCV группы на TCV в транс изомере приводит к увеличению значений β на ~ 40%. Учет влияния растворителя приводит к заметному росту электрических характеристик: в среднем для обоих хромофоров наблюдается двукратное увеличение значений первых гиперполяризуемостей.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Программы Президиума РАН № 32

УДК 544.032

СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЕ НА МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЕ В ЭПОКСИ-ТЕРМОПЛАСТИЧНЫХ СИСТЕМАХ¹

Шапагин А.В., Чалых А.Е.

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4
e-mail: shapagin@mail.ru*

Развитие современной промышленности характеризуется повышением требований к полимерным реакционноспособным связующим композиционных материалов. Улучшения эксплуатационных характеристик широко используемых эпоксидных связующих зачастую добиваются их модификацией термопластичными полимерами. Большое значение при такой модификации оказывают не только физико-химические свойства чистых компонентов, но и взаимная растворимость, трансляционная подвижность исходных компонентов, определяющие структурообразование в процессе химической реакции отверждения. В работе на примере эпоксидных олигомеров и ряда термопластичных полимеров с широким диапазоном температур стеклования методами электронной сканирующей микроскопии (Philips SEM-500), интерферометрии (ОДА-2) и физико-механическими исследованиями (Zwick/Roell Z010) изучены физико-химические основы формирования фазовых структур в процессе химической реакции отверждения как из гомогенных эпокси-термопластичных смесей, так и из частично совместимых систем с формированием на межфазной границе диффузионных зон с последующим образованием в них градиентных дисперсных структур. Формирование фазовых структур типа «взаимопроникающих фаз» и «матрица-дисперсия» с различным составом фазовых структур и распределением фаз по размерам значительно сказывается на физико-механических характеристиках эпокситермопластичных связующих и градиентных межфазных зон со сложной архитектурой.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда, проект № 17-03-00197 А

УДК 541.6

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ЯМР-ИССЛЕДОВАНИЕ ПОДВИЖНОСТИ В ПЕПТИДНЫХ ДЕНДРИМЕРАХ

Шевелева Н.Н., Маркелов Д.А.

*Санкт-Петербургский государственный университет
199034, г. Санкт-Петербург, Университетская набережная, д. 7/9
e-mail: shevelevann@gmail.com*

Дендримеры – это монодисперсные макромолекулы, имеющие разветвленную древовидную структуру. Пептидные дендримеры обладают довольно высокой биосовместимостью, гибкостью и хорошей растворимостью, поэтому интересны для медицинских целей в качестве синтетических вакцин и наноконтейнеров. Локальная подвижность сегментов дендримера обуславливает его способность изменять объем внутреннего свободного пространства в зависимости от внешних условий.

Целью данной работы было изучение локальной ориентационной подвижности в пептидных дендримерах второго поколения, отличающихся друг от друга наличием боковых фрагментов у внутренних сегментов. Были приготовлены сильноразбавленные растворы дендримеров в дейтерированной воде. Методом ^1H ЯМР релаксации были измерены значения скорости спин-решеточной релаксации, $1/T_{1H}$, в интервале температур от 283 до 343 К. Гидродинамические радиусы и эффективная плотность дендримеров были вычислены с помощью диффузионных измерений. Анализ температурных зависимостей $1/T_{1H}$ внутренних $\text{CH}_2\text{-N}$ групп показал, что ориентационная подвижность внутренних сегментов двух дендримеров практически одинаковая. Обнаружено, что локальная подвижность $\text{CH}_2\text{-N}$ групп, расположенных в боковых фрагментах, совпадает с подвижностью терминальных сегментов дендримера.

УДК 544.72

АНОМАЛЬНЫЙ ПЕРЕНОС ЭНЕРГИИ В УЛЬТРАТОНКИХ ПЛЕНКАХ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ НАФТАЛИМИДА И ТЕТРАФЕНИЛПОРФИРИНА¹

Шепелева И.И.^{а,б}, Шокуров А.В.^а, Коновалова Н.В.^б, Райтман О.А.^а,
Арсланов В.В.^а, Селектор С.Л.^а

^аЛаборатория физической химии супрамолекулярных систем,
Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4

^бМосковский технологический университет
119571, г. Москва, проспект Вернадского, д. 86
e-mail: pcss_lab@mail.ru

Использование резонансного переноса энергии электронного возбуждения позволяет существенно расширить области рабочих длин волн фотовольтаических и фотокаталитических систем. Однако, условия реализации этого процесса в ультратонких пленках недостаточно изучены. Поэтому, основной задачей данной

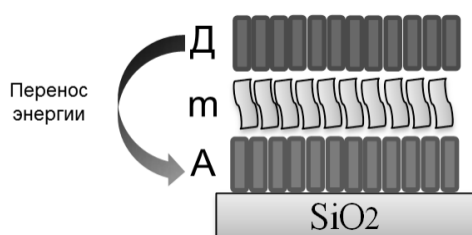


Рис. 1. Схема многослойной пленки, в которой донор (Д) и акцептор энергии (А) разделены слоем, состоящим из m монослоев спейсера

работы было исследование переноса энергии фотовозбуждения между структурно-различными хромофорами в организованных ультратонких пленках и оптимизация на этой основе условий для эффективной передачи энергии в таких системах. В работе продемонстрирована реализация процесса безызлучательного переноса энергии в смешанных монослоях и пленках Ленгмюра-

Блоджетт производного тетрафенилпорфирина, выступающего в качестве акцептора энергии, и нафталимида, выполняющего роль донора. В случае смешанных монослоев показано, что при планарном сжатии системы, которое приводит к уменьшению расстояния между донорным и акцепторным компонентами, наблюдается постепенное увеличение эффективности переноса энергии, что указывает на Ферстеровскую природу данного процесса. Установлено, что перенос энергии в полислойных смешанных пленках на основе данных соединений согласуется с теорией о безызлучательном переносе энергии. В случае

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, №№ 16-03-00538_а и 13-03-12473-офи

многослойных систем, в которых монослой донора и акцептора разделены инертным спейсерным слоем из стеариновой кислоты (рис. 1), было обнаружено наличие максимума на зависимости эффективности процесса переноса энергии от расстояния между донором и акцептором, что не соответствует классическим представлениям о Ферстеровском переносе энергии в объемных системах с точечными источниками и приемниками возбуждения. Наиболее эффективный перенос наблюдался при толщине разделяющего слоя около 5 нм (2 слоя стеариновой кислоты).

УДК 541.64:532.73

СИСТЕМА «ХИТОЗАН-ПЕКТИН-ВОДА»: КОНФОРМАЦИОННОЕ И ИОНИЗАЦИОННОЕ СОСТОЯНИЕ МАКРОМОЛЕКУЛШилова С.В., Басырова С.И., Третьякова А.Я., Барабанов В.П.*Казанский национальный исследовательский технологический университет
420015, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68
e-mail: s_shilova74@mail.ru*

В последние десятилетия предметом интенсивных исследований являются полимеры природного происхождения. Среди них особо выделяются такие полимеры как хитозан и пектин. Исключительно перспективным направлением применения данных полимеров является биоинкапсулирование. Цель данной работы заключалась в изучении изменения конформационного и ионизационного состояния макромолекул в процессе формирования полиэлектролитных комплексов хитозана с пектином и последующем получении капсул на их основе. Объектами исследования являлись образцы гидрохлорида хитозана с молекулярной массой M 38700, (ЗАО «Биопрогресс») и низкоэтерифицированного цитрусового пектина с молекулярной массой M 64000 («Sigma-Aldrich»).

Показано, что для хитозана и пектина отмечается нелинейное возрастание приведенной вязкости с уменьшением их концентрации в растворе, т.е. проявляется полиэлектролитное набухание. Установлено, что при добавлении концентрированного раствора хитозана ($3.0 \cdot 10^{-3}$ моль/л) к более разбавленному раствору пектина ($7.5 \cdot 10^{-4}$ моль/л) образуется комплекс за счет электростатического взаимодействия протонированных аминогрупп хитозана и карбоксильных групп пектина. Электрокинетический потенциал макромолекул пектина имеет отрицательное значение. Добавление хитозана в раствор пектина сопровождается увеличением дзета-потенциала вплоть до нейтрализации заряда вследствие образования комплекса хитозан–пектин стехиометрического состава. Дальнейший рост концентрации хитозана сопровождается перезарядкой комплекса.

УДК 530.1; 577.3

НЕЛИНЕЙНЫЕ ЭФФЕКТЫ В ФИЗИКЕ ДНКШиховцева Е.С.

*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН
450075, г. Уфа, пр. Октября, д. 71
e-mail: elshik@anrb.ru*

В обзорной части доклада представлены основные классы задач нелинейной динамики молекулы ДНК в рамках однокомпонентных и двухкомпонентных моделей. Как в однокомпонентных, так и в двухкомпонентных моделях (при наличии нелинейных продольных импульсов растяжения или сжатия вдоль основной цепи молекулы), вращательные движения оснований описываются решениями возмущенного уравнения синус-Гордона. При этом движения репликационной вилки вдоль молекулы описываются односолитонными решениями, а эволюция пузырей транскрипции – двухсолитонными решениями.

В оригинальной части работы в двухкомпонентной модели представлена классификация возможных способов движения транскрипционной вилки вдоль молекулы ДНК.

УДК 539.186.2

РОЛЬ МИГРАЦИИ АТОМОВ ВОДОРОДА В РЕАКЦИЯХ ДИССОЦИАТИВНОГО ЗАХВАТА ЭЛЕКТРОНОВ МОЛЕКУЛАМИ ТИРОЗИНА¹

Щукин П.В., Муфтахов М.В.

*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН
450075, г. Уфа, пр. Октября, д. 71
e-mail: Pavel@anrb.ru*

Тирозин является одной из двадцати протеиногенных аминокислот и наряду с триптофаном и фенилаланином относится к ароматическим аминокислотам. Боковая функциональная группы тирозина состоит из фенольного фрагмента, гидроксильный Н-атом которого во многом определяет свойства данной аминокислоты. Ранее было установлено, что одним из эффективных процессов деградации пептидных связей в аминокислотной цепи при резонансных электронно-индуцированных реакциях выступают перегруппировочные процессы с участием подвижных атомов водорода, в том числе карбоксильной группы. Основной целью настоящей работы было определение участия гидроксильного атома водорода фенольной группы тирозина в процессах фрагментации его молекулярных отрицательных ионов. С этой целью в масс-спектрометрическом эксперименте были исследованы газофазные процессы диссоциативного захвата электронов молекулами тирозина. В результате было установлено: 1) эффективное образование ионов $[M-H]^-$ с феноксидной структурой в результате элиминирования фенольного атома водорода, 2) нестабильность данных анионов относительно автонетрализации и дальнейшей фрагментации, в том числе, в результате процессов дезаминирования и декарбоксилирования, 3) миграция гидроксильного Н-атома фенольной группы к атомам углерода C_α и C_β , с образованием феноксид ионов бокового фрагмента, 4) реализация указанных перегруппировочных процессов по механизму «ring-walk» с поэтапным перемещением атома водорода по ароматическому циклу посредством реакций сдвига.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 16-08-00384_a

УДК 541.64: 541.65.654:628.9.037: 628.9.038

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА СИНТЕЗА ПОЛИФЛУОРЕНОВ В МИКРОВОЛНОВОМ РЕАКТОРЕ МЕТОДОМ ЭЖХ

Якиманский А.В., Носова Г.И., Литвинова Л.С., Березин И.А., Жукова Е.В.,
Смыслов Р.Ю.

*Институт высокомолекулярных соединений РАН
199004, г. Санкт-Петербург, В.О. Большой проспект, д. 31
e-mail: yakimansky@yahoo.com*

В настоящей работе изучен синтез полифлуоренов по методу Судзуки, полученных под воздействием микроволнового нагрева. С помощью метода эксклюзионной жидкостной хроматографии (ЭЖХ) рассмотрены последовательные стадии процесса поликонденсации, включая образование олигомеров, рост цепи и закрытие концевых групп. Синтез полимеров (рис. 1), проводили в микроволновом реакторе «Discover LabMate» в растворителе толуол-вода.

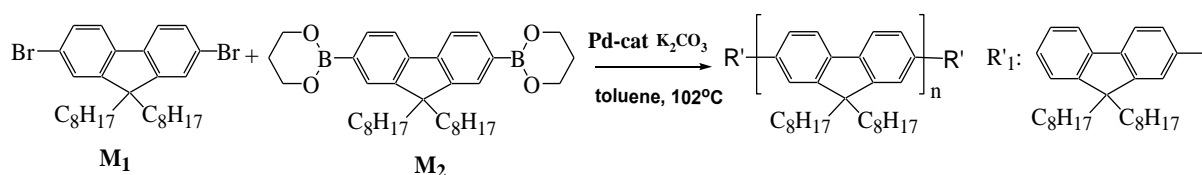


Рис. 1. Схема синтеза полифлуорена

Показано, что проведение синтеза при микроволновом нагреве в открытой системе, по сравнению с закрытой, увеличивает время синтеза с 20 до 180 мин., и значительно снижает время синтеза по сравнению с конвекционным нагревом (25-40 ч.) при сохранении условий синтеза. Преимущество используемой установки и схемы синтеза состоит в обеспечении последовательности и непрерывности условий проведения стабильного синтеза полимеров. При этом растворитель толуол-вода позволяет (в отличие от закрытой системы) получать при 100°C полимеры с $M_w = 30000-240000$ в зависимости от типа и загрузки катализатора.

УДК 541.64, 544.032, 547-304.4, 54-126

СОЗДАНИЕ ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ СОПОЛИМЕРОВ МЕТИЛМЕТАКРИЛАТА И МЕТАКРИЛАТОВ, СОДЕРЖАЩИХ РАЗЛИЧНЫЕ ХРОМОФОРНЫЕ ФРАГМЕНТЫ¹

Яковлева Е.О., Кадырова А.А., Вахонина Т.А., Иванова Н.В., Низамеев И.Р.,
Балакина М.Ю.

*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН
420088, г. Казань, ул. Ак. Арбузова, д. 8
e-mail: ekaterinaakovleva189@gmail.com*

Работа посвящена синтезу и изучению свойств метакриловых сополимеров на основе метимметакрилата с 4-[N-метил,N-(3-метакрилоилокси-2-гидроксипропил)]амино-4'-азобензолом, содержащим в *para*-положении различные электроноакцепторные группы.

Синтез сополимеров проводили в растворе ДМФА при 70 °С, содержание хромофор-содержащих метакрилатов в реакционной смеси изменяли от 5% моль до 50% моль. Были исследованы некоторые физико-химические характеристики сополимеров, такие как молекулярная масса, температура стеклования, термостойкость. Методом Келена-Тюдеша были определены относительные активности мономеров в реакции сополимеризации.

Методом наливки при вращении были изготовлены тонкие пленки (200-300 нм). Электретирование пленок проведено в поле коронного разряда. Методом генерации второй гармоники измерены нелинейно-оптические коэффициенты, эллипсометрическим методом Тенга-Мана измерены электрооптические коэффициенты синтезированных материалов.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 38

УДК 541.64:539.3

**СОЗДАНИЕ МИКРО- И НАНОРЕЛЬЕФА НА ПЛЕНКАХ
ПОЛИПРОПИЛЕНА С АЛЮМИНИЕВЫМ ПОКРЫТИЕМ¹**

Ярышева А.Ю.^а, Малахов С.Н.^б, Стрельцов Д.Р.^б, Ярышева Л.М.^а, Чвалун С.Н.^б,
Волынский А.Л.^а

*^аМосковский государственный университет им. М.В. Ломоносова
119991, г. Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3, химический факультет*

*^бНациональный исследовательский центр «Курчатовский институт»
123182, г. Москва, пл. Ак. Курчатова, д. 1
e-mail: alyonusha@gmail.com*

Среди методов создания рельефов на полимерной поверхности особое место занимают подходы, основанные на потере устойчивости систем типа «твердое покрытие на гибкой полимерной подложке». В данной работе рельефы были получены на промышленных пленках полипропилена с тонким (30 нм) алюминиевым покрытием. Потеря устойчивости системы и образование рельефа происходили вследствие сжимающих напряжений, возникающих при термостимулируемой усадке пленок. При отжиге на поверхности пленок наблюдалось образование рельефа в виде ячеистой структуры со складками в разных направлениях. Увеличение температуры отжига (от 100 до 155°C) сопровождалось увеличением периода (от 2 до 10 мкм) и глубины (от 50 до 800 нм) складок. Было показано, что рельеф сохраняется после удаления алюминиевого слоя. Таким образом, отжиг бислоевых пленок может служить эффективным контролируемым способом создания регулярных рельефов микро- и наноуровня на полимерной поверхности. Подобные материалы могут использоваться, например, в качестве субстратов для ориентации жидких кристаллов, шаблонов для упорядоченного расположения наночастиц, в качестве супергидрофобных и самоочищающихся материалов.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, научный проект № 18-03-00507 а

АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

В

Ванерҗее S., 17

А

Абдрахманов А.М., 30, 121
 Абдрахманова Л.А., 5
 Абсаляммов Д.З., 6
 Акопова Т.А., 102
 Александров Ю.Д., 7
 Алентьев А.Ю., 8, 142
 Алиев А.Д., 57
 Алиев А.Р., 9
 Алиев З.А., 9
 Амарантов С.В., 10
 Амирова Л.М., 14, 135
 Аникин А.Н., 16
 Анохин Д.В., 36
 Антонов С.В., 142
 Арсланов В.В., 55, 56, 95, 148
 Асфандиаров Н.Л., 11
 Ахмедов А.А., 12
 Ахмедов И.Р., 9
 Ахметзянова Г.И., 28, 113
 Ашихмин А.А., 29

Б

Бабуркин П.О., 84
 Бадамшина Э.Р., 36, 43, 65, 120
 Балькаев Д.А., 14
 Бакиров А.В., 78
 Балакина М.Ю., 25, 145, 154
 Барабанов В.П., 150
 Басырова Е.Р., 15
 Басырова С.И., 150
 Батуев Е.А., 86
 Баязитов А.А., 16
 Белов Н.А., 17, 92, 93, 142
 Беломоина Н.М., 22
 Белоусов С.И., 78, 79
 Березин И.А., 153
 Бессонова Н.П., 18
 Бобков А.С., 19
 Богданова Ю.Г., 20
 Бубнова М.Л., 23, 71, 81
 Будылин Н.Ю., 21, 118
 Бузин М.И., 22

Булидорова Г.В., 106
 Булычева Е.Г., 22

В

Ваганов Е.В., 23
 Валишина З.Т., 134
 Ванчугов А.А., 24
 Васильев А.Н., 115
 Васильев В.Г., 22
 Васильев И.В., 25
 Васильев С.Г., 81
 Вахонина Т.А., 154
 Веселая М.И., 68
 Власова И.Э., 115
 Волков В.И., 81
 Волков В.Я., 26, 114
 Волошин Н.А., 55
 Волынский А.Л., 155
 Воронкова В.К., 111
 Высоцкий В.В., 27, 44, 69

Г

Гайсина А.Р., 121
 Галимуллина С.И., 28, 29
 Галиязметов В.Д., 133
 Галина А.А., 121
 Галяметдинов Ю.Г., 47, 66, 67, 77, 106, 110, 111, 116
 Гареев Б.М., 30
 Гаркушина И.С., 31
 Гатчин Ю.А., 72
 Гафиятуллина С.И., 60
 Герасимов В.К., 103
 Герасимов Д.Н., 121
 Гибадуллин И.З., 129
 Гибадуллин А.Н., 32
 Гогелашвили Г.Ш., 33, 34
 Гойхман М.Я., 76
 Голубев А.Е., 134
 Голубева И.Ю., 35
 Гопин А.В., 115
 Горбунова М.А., 36
 Городнев И.О., 134
 Гофман И.В., 76
 Грачев В.П., 81
 Гребенюк С.А., 138
 Грибкова О.Л., 57
 Григорьева А.В., 37

Грин М.А., 95
 Гринвальд И.И., 38
 Грищук А.А., 36, 120
 Грунин Л.Ю., 39, 40, 54, 139
 Грунин Ю.Б., 33, 34, 40, 75
 Грушевская А.И., 38
 Губочкина А.А., 125
 Гусев В.В., 104

Д

Давлетбаева И.М., 41, 46, 48, 112, 127
 Давлитова Г.Д., 133
 Даниленко В.М., 86
 Делев В.А., 42
 Демина В.А., 82
 Джаббаров И.М., 41, 48, 127
 Джалмуханова А.С., 43
 Дзарданов Д.В., 44
 Динисламова А.А., 129
 Дудочкина Д.П., 45
 Дулмаев С.Э., 46, 112, 127
 Дьякова Е.Д., 83
 Дьячков А.В., 53

Е

Емелина О.Ю., 46, 112
 Еникеев К.И., 115

Ж

Жаворонок Е.С., 74, 126
 Жукова Е.В., 153
 Жукова К.О., 47

З

Загребельный О.А., 76
 Зайцев В.Ю., 36
 Зайцева А.В., 27
 Зайченко Н.Л., 56
 Заречная О.М., 138
 Зарипов И.И., 41, 48
 Захаров А.В., 49
 Захарченко Н.Л., 50
 Зимина М.В., 116
 Зуев Ю.Ф., 50

И

Ибатуллин И.М., 60

Иванов В.Ф., 57
 Иванов Д.С., 51
 Иванов П.Л., 52, 59
 Иванова А.Г., 76
 Иванова М.В., 53
 Иванова М.С., 54
 Иванова Н.В., 154
 Ивахненко А.А., 55
 Ивахненко Д.А., 56
 Ившин С.С., 129
 Иорданский А.Л., 97
 Исакова А.А., 57
 Исхаков А.Ф., 48

К

Кадомцева А.В., 58
 Кадиров М.К., 90, 91, 117
 Кадырова А.А., 154
 Какагасанов М.Г., 9
 Калагаев И.Ю., 38
 Калапышина И.И., 72
 Калдарь Ю.Р., 127
 Калмыкова Т.П., 59
 Камалов А.Н., 60
 Капустин Р.В., 38
 Карасева И.Н., 61
 Карасик А.А., 90, 91
 Каримуллин К.Р., 62
 Карнаух Г.Е., 35, 64, 80
 Карпов С.В., 43, 65
 Карпова С.Г., 97
 Карякин М.Е., 66
 Кашина Е.С., 67
 Каюмов М.Н., 46, 112
 Кечекьян А.С., 142
 Кильдеева Н.Р., 125
 Кирш А.А., 68
 Кирш В.А., 68, 69
 Китанин Д.С., 70
 Ключин Е.С., 119
 Князев А.А., 66, 77
 Коваленко В.И., 122
 Комендант Р.И., 71
 Комратова В.В., 36, 43
 Коновалова Н.В., 148
 Корнюшина Т.П., 114
 Коробейников А.Г., 72
 Коровин А.Н., 83
 Королев В.Л., 86
 Косакович Е.О., 74
 Костина Ю.В., 57, 59
 Косточко А.В., 134

Котенко А.А., 138
 Кравченко Э.Ф., 129
 Крайнов А.А., 110
 Красильникова С.В., 75
 Краснопеева Е.Л., 76
 Крашенинников С.В., 18
 Крестелев А.И., 104
 Кречетова И.В., 33
 Крупин А.С., 77
 Крылатых Н.А., 16
 Кузнецов Н.М., 78, 79
 Кулагина Т.П., 35, 80
 Курбатова С.В., 61
 Курочкин С.А., 23, 71, 81
 Кусова А.М., 50

Л

Ладычук Д.В., 33, 34
 Лесничая В.А., 36
 Лисевич И., 50
 Литвинова Л.С., 153
 Лобанов А.В., 97
 Лодыгина В.П., 43
 Лопатина Л.И., 7
 Лукин В.Г., 136
 Любимов А.В., 56
 Любимова Г.В., 56

М

Магсумова А.Ф., 60
 Мадиярова Г.М., 135
 Макарова Р.А., 109
 Малахов С.Н., 82, 155
 Малахова Ю.Н., 83
 Малков Г.В., 65
 Малышев М.Д., 84
 Маркелов Д.А., 147
 Масас Д.С., 40
 Масленников А.С., 34
 Матухин В.Л., 28, 29, 70, 113, 133
 Махмутова Л.И., 89
 Махонина Л.И., 81
 Мельникова Д.Л., 85
 Меркулова Н.Л., 86
 Миронов Г.И., 37, 49, 87, 88
 Михайлов А.С., 129
 Михайлов В.А., 138
 Муфтахов М.В., 123, 137, 152
 Мухлина Е.С., 70

Н

Назарова А.А., 89
 Нафикова Е.П., 11
 Некрасов А.А., 57
 Нестерова В.П., 128
 Нефедьев Е.С., 91, 117
 Низамеев И.Р., 90, 91, 117, 154
 Низамеева Г.Р., 90, 91
 Низамов Р.К., 5
 Никифоров Р.Ю., 17, 92, 93
 Никифорова Г.Г., 22
 Николаев К.В., 70
 Никулова У.В., 94
 Новак Д.Н., 95
 Новгородова В.Д., 77
 Носова Г.И., 153

О

Образцова Н.А., 23, 71
 Озерин А.Н., 102
 Ольхов А.А., 97
 Орел В.Б., 6

П

Падня П.Л., 99
 Панкратьев Е.Ю., 100, 123
 Пауль М.Э., 115
 Пахомов П.М., 84
 Перепелицина Е.О., 23, 65, 71, 81
 Перечесова А.Д., 72
 Пестряев Е.М., 101
 Петерс Г.С., 78
 Петрова Т.Ф., 102, 103
 Пивина Т.С., 86
 Писарев О.А., 31
 Погорельцев А.И., 28, 29, 70, 113, 133
 Подешво И.В., 76
 Полуниин Е.В., 92, 93
 Полунина И.А., 44
 Поляков В.И., 72
 Полякова И.В., 31
 Попков В.И., 104
 Попкова А.В., 104
 Попов А.А., 97
 Проскурина В.Е., 67, 106
 Пулялина А.Ю., 128
 Пшеничнюк С.А., 11

Р

Рабинович А.Л., 106
 Райтман О.А., 55, 56, 95,
 106, 123, 148
 Рахмеев Р.Г., 11
 Рогатко М.И., 109
 Ролдугин В.И., 27
 Романова К.А., 110
 Рыжих В.Е., 17

С

Сагдеев Д.О., 11
 Сазонов О.О., 41, 46, 112
 Сапожников А.М., 10
 Сафонов А.В., 74
 Сафонова Л.П., 130
 Сафонова О.А., 28, 29, 113
 Сахаров Б.В., 26, 114
 Северин А.В., 59, 115
 Седишев И.П., 74
 Селектор С.Л., 148
 Селиванова Н.М., 116
 Семенов А.Д., 88
 Семенов В.А., 117
 Семенова Р.Г., 109
 Сенчихин И.Н., 27, 69, 74,
 126, 143
 Скалдин О.А., 15
 Скирда В.Д., 51, 85
 Смыслов Р.Ю., 153
 Соколов М.А., 78, 79
 Спиридонова Ю.С., 90, 91
 Спирин И.А., 38
 Степаненко В.Ю., 118, 119
 Стойков И.И., 12, 89, 99
 Столярова Д.Ю., 78, 79
 Стрельник И.Д., 90, 91
 Стрельцов Д.Р., 155
 Сурнова А.В., 14
 Суровяткина Е.В., 119
 Суханов А.А., 111
 Сухоруков С.А., 14

Т

Талис А.Л., 106
 Тарасов А.Е., 120
 Тверской В.А., 57
 Терентьев А.Г., 53
 Тимиров Ю.И., 15, 42
 Третьякова А.Я., 150
 Туктамышева Р.А., 122

Туктаров Р.Ф., 123
 Тухбатуллин А.А., 121
 Тюбаева П.М., 97

У

Ульябаева Г.Р., 125
 Уродкова Е.К., 126
 Урюпина О.Я., 27, 126

Ф

Файзулина З.З., 41, 48, 127
 Файзуллин Д.А., 50
 Файков И.И., 128
 Фаттахов Я.В., 16
 Фахрутдинов А.Р., 16
 Федоров Ю.И., 129
 Федорова И.В., 130
 Федосовский М.Е., 72
 Фельдман Э.Б., 131
 Филиппов А.В., 32
 Фоминых О.Д., 25
 Фролов А.С., 133

Х

Хабипов Р.Ш., 16
 Хакимзянова Р.И., 134
 Халимов М.А., 54
 Хаматгалимов А.Р., 122
 Хамидуллин О.Л., 135
 Хантимиров А.Г., 5
 Харитонов Е.В., 143
 Харитонов Т.В., 144
 Хасанова Н.М., 26
 Хасбиуллин Р.Р., 21
 Хатымов Р.В., 123, 137
 Хатымова Л.З., 136
 Хвостенко О.Г., 136, 140
 Хижняк С.Д., 84
 Хилько С.Л., 109, 138
 Хозин В.Г., 5, 34
 Храмов М.В., 114

Ц

Целищева Л.В., 33, 139
 Цеплин Е.Е., 140, 141
 Цеплина С.Н., 140, 141

Ч

Чалых А.Е., 21, 94, 102, 103,
 118, 119, 146

Чвалун С.Н., 78, 79, 82, 83,
 155
 Чеботарева Н.А., 10
 Чирков С.В., 142

Ш

Шабатин А.В., 69, 143, 144
 Шагалов В.А., 16
 Шайдуллин Ф.Р., 28, 113
 Шалин Н.И., 145
 Шамилов Р.Р., 47, 111
 Шамсутдинова Р.А., 41, 127
 Шапагин А.В., 21, 146
 Шарипов Г.Л., 30, 121
 Шарипова А.В., 25
 Шарипова А.Р., 28, 29
 Шахов М.Н., 68
 Шевелева Н.Н., 147
 Шепелева И.И., 148
 Шилова С.В., 106, 150
 Шилова О.А., 76
 Шиховцева Е.С., 151
 Шмидт Е.В., 29, 70
 Шокуров А.В., 95, 148
 Штеренберг А.М., 104
 Шурпик Д.Н., 12

Щ

Щербань В.В., 83
 Щербина А.А., 45
 Щербина М.А., 18
 Щукин П.В., 137, 152

Я

Ягудаева Е.Ю., 83
 Якиманский А.В., 76, 153
 Яковлева Е.О., 154
 Ямпольский Ю.П., 17
 Ярышева А.Ю., 155
 Ярышева Л.М., 155

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ-----	4
<i>Абдрахманова Л.А., Хантимиров А.Г., Низамов Р.К., Хозин В.Г.</i> НАНОМОДИФИКАЦИЯ ПОЛИВИНИЛХЛОРИДА ДИСПЕРСИЯМИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР-----	5
<i>Абсалямов Д.З., Орел В.Б.</i> КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АЦЕТОФЕНОНА И 4-СІ- Ph-МЕТИЛКЕТОНА С АЦЕТИЛЕНОМ -----	6
<i>Александров Ю.Д., Лопатина Л.И.</i> ОБРАЗОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ ДНК-----	7
<i>Алентьев А.Ю.</i> ГАЗОПРОНИЦАЕМОСТЬ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ. ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ, ВОЗМОЖНОСТИ И ОГРАНИЧЕНИЯ-----	8
<i>Алиев А.Р., Ахмедов И.Р., Какагасанов М.Г., Алиев З.А.</i> КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ БИНАРНЫХ СИСТЕМ -----	9
<i>Амарантов С.В., Чеботарева Н.А., Сапожников А.М.</i> ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ ИЗ БОЛЬШИХ И МАЛЫХ БЕЛКОВ ТЕПЛОВОГО ШОКА В РАСТВОРЕ МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ -----	10
<i>Асфандиаров Н.Л., Пшеничнюк С.А., Нафикова Е.П., Рахмеев Р.Г.</i> ДИССОЦИАТИВНЫЙ ЗАХВАТ ЭЛЕКТРОНОВ ГУМИНОВЫМИ СОЕДИНЕНИЯМИ -----	11
<i>Ахмедов А.А., Шуртик Д.Н., Стойков И.И.</i> ДИЗАЙН МЕМБРАННЫХ ЯКОРЕЙ НА ПЛАТФОРМЕ АМФИФИЛЬНЫХ ТРИГЛИЦЕРИДОВ, СОДЕРЖАЩИХ АММОНИЕВУЮ ГРУППУ И ФРАГМЕНТЫ ГЕРАНИОЛА-----	12
<i>Балькаев Д.А., Сурнова А.В., Сухоруков С.А., Амирова Л.М.</i> ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ПОЛИПРОПИЛЕНА В ПРИСУТСТВИИ НУКЛЕАТОРОВ -----	14
<i>Басырова Е.Р., Тимиров Ю.И., Скалдин О.А.</i> ДИНАМИКА ХОЛЕСТЕРИЧЕСКИХ ПАЛЬЦЕВ И ФОРМИРОВАНИЕ ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУР В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ-----	15
<i>Баязитов А.А., Фаттахов Я.В., Фахрутдинов А.Р., Шагалов В.А., Аникин А.Н., Хабинов Р.Ш., Крылатых Н.А.</i> ДАТЧИК «КОЛЕНО» ДЛЯ СПЕЦИАЛИЗИРОВАННОГО МАГНИТНО-РЕЗОНАНСНОГО ТОМОГРАФА-----	16
<i>Белов Н.А., Никифоров Р.Ю., Вангерее S., Рыжих В.Е., Ямпольский Ю.П.</i> ПРОНИЦАЕМОСТЬ И ДИФФУЗИЯ ГАЗОВ ДЛЯ НОВЫХ ФТОРСОДЕРЖАЩИХ ПОЛИЭФИРИМИДОВ-----	17
<i>Бессонова Н.П., Крашенинников С.В., Щербина М.А.</i> ТЕРМОДИНАМИКА ДЕФОРМАЦИИ НИЗКО КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПОЛИОЛЕФИНОВ ----	18
<i>Бобков А.С.</i> КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ АЛЬДОЛЬНОЙ КОНДЕНСАЦИИ КЕТОНОВ В СУПЕРОСНОВНОЙ СРЕДЕ-----	19
<i>Богданова Ю.Г.</i> МІМ ТЕХНОЛОГИЯ: МЕТОДЫ УДАЛЕНИЯ СВЯЗУЮЩИХ ИЗ ТВЕРДЫХ МЕТАЛЛ- ПОЛИМЕРНЫХ ДИСПЕРСИЙ-----	20
<i>Будылин Н.Ю., Шапагин А.В., Хасбиуллин Р.Р., Чалых А.Е.</i> РАСТВОРИМОСТЬ, ВЗАИМОДИФФУЗИЯ И ОТВЕРЖДЕНИЕ В СИСТЕМЕ ЭПОКСИДНЫЙ «ОЛИГОМЕР-ДИАМИНОДИФЕНИЛСУЛЬФОН» -----	21

<i>Бузин М.И., Булычева Е.Г., Беломоина Н.М., Никифорова Г.Г., Васильев В.Г.</i> СИНТЕЗ РАСТВОРИМОГО ПОЛИНАФТОИЛЕНБЕНЗИМИДАЗОЛА НА ОСНОВЕ 2,2-БИС[4-(3,4-ДИАМИНОФЕНОКСИ)ФЕНИЛ]ГЕКСА-ФТОРПРОПАНА И ДИАНГИДРИДА 1,3-БИС-(1,8-ДИКАРБОКСИ-НАФТОИЛ-4)БЕНЗОЛА -----	22
<i>Ваганов Е.В., Перепелицина Е.О., Бубнова М.Л., Образцова Н.А., Курочкин С.А.</i> МОДИФИЦИРОВАНИЕ ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТА ЛИНЕЙНЫМИ СОПОЛИМЕРАМИ Н-БУТИЛАКРИЛАТА И СТИРОЛА С РАЗНОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ МАССОЙ -----	23
<i>Ванчугов А.А.</i> ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ГРАФЕНА В ПРИБЛИЖЕНИИ СТАТИЧЕСКИХ ФЛУКТУАЦИЙ В РАМКАХ МОДЕЛИ ХАББАРДА -----	24
<i>Васильев И.В., Шарипова А.В., Фоминых О.Д., Балакина М.Ю.</i> ИССЛЕДОВАНИЕ НЕВАЛЕНТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ПРИ ДИЗАЙНЕ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ С КВАДРАТИЧНОЙ НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТЬЮ -----	25
<i>Волков В.Я., Сахаров Б.В., Хасанова Н.М.</i> МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА SARA-ФРАКЦИЙ ТЯЖЕЛОЙ НЕФТИ ПО ДАННЫМ ЯМР РЕЛАКСАЦИИ В НИЗКИХ ПОЛЯХ -----	26
<i>Высоцкий В.В., Ролдугин В.И., Урюпина О.Я., Сенчихин И.Н., Зайцева А.В.</i> ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ИСПАРЕНИЯ НА СТРУКТУРУ И ПРОВОДИМОСТЬ ТОНКИХ ПЛЕНОК, СФОРМИРОВАННЫХ МЕТОДОМ ПОДВИЖНОГО МЕНИСКА ИЗ НАНОДИСПЕРСИЙ ЧАСТИЦ СЕРЕБРА -----	27
<i>Галимуллина С.И., Сафонова О.А., Шарипова А.Р., Шайдуллин Ф.Р., Ахметзянова Г.И., Погорельцев А.И., Матухин В.Л.</i> ФОРМИРОВАНИЕ ГЭП НА ЯДРАХ La В СИСТЕМЕ La ₂ CuO ₄ -----	28
<i>Галимуллина С.И., Шарипова А.Р., Сафонова О.А., Ашихмин А.А., Погорельцев А.И., Матухин В.Л., Шмидт Е.В.</i> ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ДИАГРАММЫ В ДЕЛАФОССИТЕ CuAlO ₂ -----	29
<i>Гареев Б.М., Абдрахманов А.М., Шарипов Г.Л.</i> МЕХАНИЗМЫ ВОЗБУЖДЕНИЯ СОНОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ НЕЛЕТУЧИХ СОЕДИНЕНИЙ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ В РАСТВОРАХ СЕРНОЙ КИСЛОТЫ-----	30
<i>Гаркушина И.С., Полякова И.В., Писарев О.А.</i> ДЕСОРБЦИЯ ЭРИТРОМИЦИНА С МОНОЛИТНЫХ МОЛЕКУЛЯРНО ИМПРИНТИРОВАННЫХ СОРБЕНТОВ -----	31
<i>Гибайдуллин А.Н., Филиппов А.В.</i> ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ СМЕСЕЙ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ МЕТОДОМ ЯМР -----	32
<i>Гогелашвили Г.Ш., Ладычук Д.В., Грунин Ю.Б., Целищева Л.В., Кречетова И.В.</i> ВЛИЯНИЕ ЖЕСТКОСВЯЗАННОЙ ВОДЫ В ЦЕЛЛЮЛОЗЕ С РАЗЛИЧНЫМИ СТЕПЕНЯМИ КРИСТАЛЛИЧНОСТИ НА ЯМР-ХАРАКТЕРИСТИКИ -----	33
<i>Гогелашвили Г.Ш., Ладычук Д.В., Хозин В.Г., Масленников А.С., Грунин Ю.Б.</i> ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТОЯНИЯ СОРБИРОВАННОЙ ВОДЫ В МИНЕРАЛЬНЫХ АДСОРБЕНТАХ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ ПОЛИМЕРНЫМ ПАВ ИМПУЛЬСНЫМ МЕТОДОМ ЯМР -----	34
<i>Голубева И.Ю., Карнаух Г.Е., Кулагина Т.П.</i> РАСЧЕТ И АНАЛИЗ СИГНАЛА СОЛИД-ЭХА В ТРЕХСПИНОВОЙ СИСТЕМЕ-----	35
<i>Горбунова М.А., Анохин Д.В., Зайцев В.Ю., Комратова В.В., Грищук А.А., Лесничая В.А., Бадамшина Э.Р.</i> ИЗУЧЕНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ И ЕЕ ЭВОЛЮЦИИ В ПРОЦЕССЕ ФИЗИЧЕСКОГО СТАРЕНИЯ ПОЛИУРЕТАНОВ-----	36

<i>Григорьева А.В., Миронов Г.И.</i> ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЙ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ОДНОСТЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ПО МЕРЕ РОСТА НАНОТРУБОК -----	37
<i>Гринвальд И.И., Калагаев И.Ю., Спирин И.А., Грушевская А.И., Капустин Р.В.</i> ВАРИАТИВНОСТЬ РОЛИ ВОДЫ В ГИДРАТООБРАЗОВАНИИ -----	38
<i>Грунин Л.Ю.</i> ИЗМЕРЕНИЕ КРИСТАЛЛИЧНОСТИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ В УСЛОВИЯХ ИНДУСТРИЛЬНОГО ON- LINE КОНТРОЛЯ -----	39
<i>Грунин Ю.Б., Грунин Л.Ю., Масас Д.С.</i> НАДМОЛЕКУЛЯРНАЯ СТРУКТУРА И СОРБЦИОННЫЕ СВОЙСТВА УВЛАЖНЯЮЩЕЙСЯ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ -----	40
<i>Давлетбаева И.М., Зарипов И.И., Джаббаров И.М., Файзулина З.З., Шамсутдинова Р.А., Сазонов О.О.</i> ИССЛЕДОВАНИЕ НАДМОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ АМФИФИЛЬНЫХ БЛОК- СОПОЛИМЕРОВ НА ОСНОВЕ 2,4-ТОЛУИЛЕНДИИЗОЦИАНАТА И МАКРОИНИЦИАТОРА С РАЗЛИЧНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ КОНЦЕВЫХ ОКСИЭТИЛЕНОВЫХ ЗВЕНЬЕВ -----	41
<i>Делев В.А., Тимиров Ю.И.</i> НАНОСТРУКТУРЫ В НЕМАТИЧЕСКОМ ЖИДКОМ КРИСТАЛЛЕ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ -----	42
<i>Джалмуханова А.С., Лодыгина В.П., Комратова В.В., Карпов С.В., Бадаמיшина Э.Р.</i> ЦИКЛИЧЕСКИЕ АМИННЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ В РЕАКЦИИ УРЕТАНООРАЗОВАНИЯ ИЗОФОРОНДИИЗОЦИАНАТА -----	43
<i>Дзарданов Д.В., Высоцкий В.В., Полунина И.А.</i> МАССООБМЕН ЭМУЛЬГИРОВАННЫХ ГЕРБИЦИДОВ МЕЖДУ ПОВЕРХНОСТЬЮ РАСТЕНИЯ И ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДОЙ -----	44
<i>Дудочкина Д.П., Щербина А.А.</i> СРАВНИТЕЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОК, МОДИФИЦИРОВАННЫХ В ПЛАЗМЕ ВЫСОКОЧАСТОТНОГО РАЗРЯДА -----	45
<i>Дулмаев С.Э., Емелина О.Ю., Сазонов О.О., Каюмов М.Н., Давлетбаева И.М.</i> ОСОБЕННОСТИ СТРОЕНИЯ ГИПЕРРАЗВЕТВЛЕННЫХ АМИНОЭФИРОВ БОРНОЙ КИСЛОТЫ -----	46
<i>Жукова К.О., Шамилов Р.Р., Галяметдинов Ю.Г.</i> ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ СУЛЬФИДА ЦИНКА ДОПИРОВАННЫЕ ИОНАМИ МЕДИ -----	47
<i>Зарипов И.И., Джаббаров И.М., Исхаков А.Ф., Файзулина З.З., Давлетбаева И.М.</i> ИССЛЕДОВАНИЕ СОРБЦИОННОЙ АКТИВНОСТИ МЕЗОПОРИСТЫХ ПОЛИМЕРОВ НА ОСНОВЕ 2,4-ТОЛУИЛЕНДИИЗОЦИАНАТА И МАКРОИНИЦИАТОРА С РАЗЛИЧНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ КОНЦЕВЫХ ОКСИЭТИЛЕНОВЫХ ЗВЕНЬЕВ -----	48
<i>Захаров А.В., Миронов Г.И.</i> ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ТИПА ЗИГЗАГ ХИРАЛЬНОСТИ (9,0) В ПРИБЛИЖЕНИИ СТАТИЧЕСКИХ ФЛУКТУАЦИЙ В РАМКАХ МОДЕЛИ ХАББАРДА -----	49
<i>Захарченко Н.Л., Файзуллин Д.А., Лисевич И., Кусова А.М., Зувев Ю.Ф.</i> ИССЛЕДОВАНИЕ ДИМЕРИЗАЦИИ БИНАЗЫ -----	50
<i>Иванов Д.С., Скирда В.Д.</i> ИЗУЧЕНИЕ АСФАЛЬТЕНОВЫХ АГРЕГАТОВ В СМОЛЕ ПО ДАННЫМ ЯМР -----	51
<i>Иванов П.Л.</i> ПРОБЛЕМЫ РЕАЛИЗАЦИИ И ПРОДВИЖЕНИЯ НАУЧНЫХ РАЗРАБОТОК В ОТРАСЛИ МЕДИЦИНЫ -----	52

<i>Иванова М.В., Дьячков А.В., Терентьев А.Г.</i> ДЕРИВАТИЗАЦИЯ МАРКЕРОВ ФИЗИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ КАК СПОСОБ ПОВЫШЕНИЯ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ МЕТОДА МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ИОНОВ-----	53
<i>Иванова М.С., Грунин Л.Ю., Халимов М.А.</i> МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ ОБЩЕГО ЖИРА В ПИЩЕВЫХ ПРОДУКТАХ ПРИ ПОМОЩИ ЯМР-РЕЛАКСАЦИИ-----	54
<i>Ивахненко А.А., Волошин Н.А., Арсланов В.В., Райтман О.А.</i> ФОТОХРОМИЗМ НОВОГО ДИФИЛЬНОГО СПИРООКСАЗИНА В РАСТВОРАХ И НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА ФАЗ-----	55
<i>Ивахненко Д.А., Любимов А.В., Любимова Г.В., Зайченко Н.Л., Арсланов В.В., Райтман О.А.</i> ФОТОХРОМНЫЕ СВОЙСТВА НОВОГО ДИФИЛЬНОГО СПИРОПИРАНА НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА ВОЗДУХ/ВОДА -----	56
<i>Исакова А.А., Тверской В.А., Алиев А.Д., Иванов В.Ф., Костина Ю.В., Грибкова О.Л., Некрасов А.А.</i> НОВЫЕ ГИБКИЕ ПРОВОДЯЩИЕ КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИАНИЛИНА -----	57
<i>Кадомцева А.В.</i> КООРДИНАЦИОННЫЕ ПОЛИМЕРЫ ГЕРМАНИЯ-----	58
<i>Калмыкова Т.П., Северин А.В., Костина Ю.В., Иванов П.Л.</i> СИНТЕЗ, СВОЙСТВА И ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ ГИДРОКСИАПАТИТА, СИТЕЗИРУЕМОГО В БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНОЙ СРЕДЕ ГИАЛУРОНОВОЙ КИСЛОТЫ-----	59
<i>Камалов А.Н., Ибатуллин И.М., Гафиятуллина С.И., Магсумова А.Ф.</i> ВЛИЯНИЕ ДИСПЕРСНЫХ НАПОЛНИТЕЛЕЙ НА ПОВЕРХНОСТНЫЕ СВОЙСТВА ЭПОКСИДНЫХ ПОЛИМЕРОВ -----	60
<i>Карасева И.Н., Курбатова С.В.</i> ВЗАИМОСВЯЗЬ «СТРУКТУРА-СВОЙСТВО» В РЯДУ АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ-----	61
<i>Каримуллин К.Р.</i> ФОТОННОЕ ЭХО В ПОЛИМЕРНЫХ НАНОКОМПОЗИТАХ, ДОПИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫМИ КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ И МЕТАЛЛО-ПОРФИРИНАМИ --	62
<i>Карнаух Г.Е.</i> ФАЗЫ ДЕЙСТВИЯ И ПЕРЕХОДЫ МЕЖДУ НИМИ -----	64
<i>Карпов С.В., Перепелицина Е.О., Малков Г.В., Бадамшина Э.Р.</i> СИНТЕЗ СВЕРХРАЗВЕТВЛЕННЫХ ПОЛИ(УРЕТАН-ТРИАЗОЛОВ) НА ОСНОВЕ ИЗОФОРОНДИИЗОЦИАНАТА -----	65
<i>Карякин М.Е., Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г.</i> ПЛАЗМОННОЕ УСИЛЕНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ АНИЗОМЕТРИЧНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ЛАНТАНОИДОВ -----	66
<i>Кашина Е.С., Проскура В.Е., Галяметдинов Ю.Г.</i> ОРГАНИЧЕСКИЕ ГИБРИДНЫЕ МАТЕРИАЛЫ КАК ЭФФЕКТИВНЫЕ ФЛОКУЛИРУЮЩИЕ АГЕНТЫ -----	67
<i>Кириш В.А., Кириш А.А., Веселая М.И., Шахов М.Н.</i> МАССОПЕРЕНОС В МОДЕЛЬНОМ СЛОЕ ВОЛОКОН, ПОКРЫТЫХ ПОРИСТЫМИ ПРОНИЦАЕМЫМИ ОБЛОЧКАМИ -----	68
<i>Кириш В.А., Сенчихин И.Н., Шабатин А.В., Высоцкий В.В.</i> ДИФФУЗИОННЫЙ МАССОПЕРЕНОС В МЕМБРАНАХ С ГРАНУЛЬНОЙ СТРУКТУРОЙ ---	69

<i>Китанин Д.С., Мухлина Е.С., Николаев К.В., Погорельцев А.И., Матухин В.Л., Шмидт Е.В.</i> ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ДИАГРАММЫ В АУРИПИГМЕНТЕ As_2S_3 -----	70
<i>Комендант Р.И., Перепелицина Е.О., Бубнова М.Л., Образцова Н.А., Курочкин С.А.</i> ВЛИЯНИЕ СОДЕРЖАНИЯ СОПОЛИМЕРА Н-БУТИЛАКРИЛАТА И СТИРОЛА НА ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТНОГО СТЕКЛА -----	71
<i>Коробейников А.Г., Перечесова А.Д., Калапышина И.И., Гатчин Ю.А., Федосовский М.Е., Поляков В.И.</i> ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ ПОЛИМЕРНОГО ПОДВЕСА ЧУВСТВИТЕЛЬНОГО ЭЛЕМЕНТА МАГНИТОМЕТРИЧЕСКОГО ПРИБОРА -----	72
<i>Косакович Е.О., Жаворонок Е.С., Седишев И.П., Сафонов А.В., Сенчихин И.Н.</i> НОВЫЕ ЭПОКСИАМИННЫЕ МАТЕРИАЛЫ, МОДИФИЦИРОВАННЫЕ ФРАГМЕНТАМИ ОЛИГОГЕКСАМЕТИЛЕНГУАНИДИНА -----	74
<i>Красильникова С.В., Грунин Ю.Б.</i> СОРБЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ИОНООБМЕННОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ ПО ДАННЫМ ЯМР-РЕЛАКСАЦИИ -----	75
<i>Краснопеева Е.Л., Подешво И.В., Гойхман М.Я., Гофман И.В., Иванова А.Г., Загребельный О.А., Шилова О.А., Якиманский А.В.</i> СИНТЕЗ, МЕХАНИЧЕСКИЕ И ПРОТОН-ПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА ПОЛИАМИДОВ И ПОЛИИМИДОВ С БОКОВЫМИ SO_3H -ГРУППАМИ -----	76
<i>Крупин А.С., Новгородова В.Д., Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г.</i> ФОТОСТАБИЛЬНОСТЬ ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ ПММА, ДОПИРОВАННОГО МЕЗОГЕННЫМ КОМПЛЕКСОМ ЕВРОПИЯ -----	77
<i>Кузнецов Н.М., Бакиров А.В., Столярова Д.Ю., Петерс Г.С., Соколов М.А., Белоусов С.И., Чвалун С.Н.</i> СТРУКТУРНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ ЧАСТИЦ МОНТМОРИЛЛОНИТА В СИЛИКОНОВОМ МАСЛЕ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ -----	78
<i>Кузнецов Н.М., Соколов М.А., Белоусов С.И., Чвалун С.Н., Столярова Д.Ю.</i> ЭЛЕКТРОРЕОЛОГИЧЕСКИЕ ЖИДКОСТИ. ЭФФЕКТ ФОРМЫ НАПОЛНИТЕЛЯ -----	79
<i>Кулагина Т.П., Карнаух Г.Е.</i> МЕТОД ИМПУЛЬСНОГО ЯМР ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРЫ И ПОДВИЖНОСТИ ПОЛИМЕРНЫХ ЦЕПЕЙ В СШИТЫХ И РАЗВЕТВЛЕННЫХ ПОЛИМЕРАХ -----	80
<i>Курочкин С.А., Махонина Л.И., Васильев С.Г., Перепелицина Е.О., Бубнова М.Л., Волков В.И., Грачев В.П.</i> ГИДРОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ РАЗВЕТВЛЕННЫХ ПОЛИСТИРОЛОВ С РАЗНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ ВЫСОКОРАЗВЕТВЛЕННОЙ ФРАКЦИИ -----	81
<i>Малахов С.Н., Демина В.А., Чвалун С.Н.</i> СТРУКТУРА И СВОЙСТВА СМЕСЕЙ ПОЛИМЕРОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИПРОПИЛЕНА И ПОЛИСТИРОЛА -----	82
<i>Малахова Ю.Н., Щербань В.В., Дьякова Е.Д., Коровин А.Н., Ягудаева Е.Ю., Чвалун С.Н.</i> СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЕ ПОЛИАНИЛИНА И ТЕТРААНИЛИНА НА ПОВЕРХНОСТИ ВОДЫ И ТВЕРДЫХ ПОДЛОЖЕК -----	83
<i>Мальшиев М.Д., Бабуркин П.О., Хижняк С.Д., Пахомов П.М.</i> МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЯ В ЦИСТЕИН-СЕРЕБРЯНОМ РАСТВОРЕ -----	84
<i>Мельникова Д.Л., Скирда В.Д.</i> ВЛИЯНИЕ ВОССТАНАВЛИВАЮЩЕГО АГЕНТА ТСЕР НА ПРОЦЕССЫ ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЯ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ БЕЛКА АЛЬФА-КАЗЕИНА -----	85
<i>Меркулова Н.Л., Даниленко В.М., Королев В.Л., Батуев Е.А., Пивина Т.С.</i> РЕАКЦИЯ ИМИДАЗО[4,5-е]БЕНЗО[1,2-с;3,4-с']ДИФУРОКСАНА С ЦИСТЕИНОМ -----	86

<i>Миронов Г.И.</i> ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ЗОЛОТЫХ НАНОТРУБОК, ЭНЕРГИИ ОПТИЧЕСКИХ ПЕРЕХОДОВ -----	87
<i>Миронов Г.И., Семенов А.Д.</i> ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ЗОЛОТЫХ НАНОТРУБОК (8,0) В МОДЕЛИ ХАББАРДА -----	88
<i>Назарова А.А., Махмутова Л.И., Стойков И.И.</i> ДРАМАТИЧЕСКОЕ ВЛИЯНИЕ ПИЛЛАР[5]АРЕНОВОЙ ПЛАТФОРМЫ НА СТАБИЛЬНОСТЬ ПРОИЗВОДНЫХ ТРЕХВАЛЕНТНОГО ФОСФОРА -----	89
<i>Низамеев И.Р., Низамеева Г.Р., Стрельник И.Д., Спиридонова Ю.С., Карасик А.А., Кадиров М.К.</i> ДИФОСФИНОВЫЕ КОМПЛЕКСЫ КОБАЛЬТА И НИКЕЛЯ КАК КАТАЛИЗАТОРЫ РЕАКЦИИ ВОССТАНОВЛЕНИЯ КИСЛОРОДА -----	90
<i>Низамеева Г.Р., Низамеев И.Р., Стрельник И.Д., Спиридонова Ю.С., Карасик А.А., Кадиров М.К., Нефедьев Е.С.</i> АГРЕГАЦИЯ ДИФОСФИНОВЫХ КОМПЛЕКСОВ КОБАЛЬТА НА ПОВЕРХНОСТИ СЛЮДЫ -----	91
<i>Никифоров Р.Ю., Полунин Е.В., Белов Н.А.</i> ГАЗОТРАНСПОРТНЫЕ И СОРБЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ПОЛИПЕРФТОР(2-МЕТИЛ-2ЭТИЛ-ДИОКСОЛА-1,3) -----	92
<i>Никифоров Р.Ю., Полунин Е.В., Белов Н.А.</i> СОРБЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ПОЛИПЕРФТОР(2-МЕТИЛ-2ЭТИЛ-ДИОКСОЛА-1,3) -----	93
<i>Никулова У.В., Чалых А.Е.</i> ФАЗОВОЕ РАВНОВЕСИЕ И ВЗАИМОДИФфуЗИЯ В СИСТЕМАХ С НКТС -----	94
<i>Новак Д.Н., Шокуров А.В., Грин М.А., Райтман О.А., Арсланов В.В., Селектор С.Л.</i> ДЕГРАДАЦИЯ МОДЕЛЬНЫХ МЕМБРАН НА ОСНОВЕ СФИНГОМИЕЛИНА, СОДЕРЖАЩИХ ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОР, ПРИ ИК-ОБЛУЧЕНИИ -----	95
<i>Ольхов А.А., Тюбаева П.М., Карпова С.Г., Лобанов А.В., Попов А.А., Иорданский А.Л.</i> СТРУКТУРА БИОПОЛИМЕРНЫХ ВОЛОКНИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ С КОМПЛЕКСАМИ ПОРФИРИНА -----	97
<i>Падня П.Л., Стойков И.И.</i> МАКРОЦИКЛИЧЕСКИЕ ИОННЫЕ ЖИДКОСТИ: ДИЗАЙН И СВОЙСТВА -----	99
<i>Панкратьев Е.Ю.</i> НАСКОЛЬКО ХОРОШО КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ОПИСЫВАЮТ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ СТРОЕНИЕ ПОЛИСУЛЬФИДОВ -----	100
<i>Пестряев Е.М.</i> КЛЕТОЧНЫЙ ЭФФЕКТ И ЛИНИЯ ФРЕНКЕЛЯ НА ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЕ -----	101
<i>Петрова Т.Ф., Чалых А.Е., Аكوпова Т.А., Озерин А.Н.</i> СОРБЦИЯ И ДИФфуЗИЯ ВОДЫ В ПРИВИТЫХ СОПОЛИМЕРАХ ХИТОЗАНА И ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА -----	102
<i>Петрова Т.Ф., Чалых А.Е., Герасимов В.К.</i> ЭВОЛЮЦИЯ ИЗОТЕРМ СОРБЦИИ ПАРОВ ВОДЫ ГИДРОФИЛЬНЫМИ ПОЛИМЕРАМИ В ПРОЦЕССЕ ТЕРМИЧЕСКОГО ОТЖИГА СОРБЕНТОВ -----	103
<i>Попков В.И., Штеренберг А.М., Гусев В.В., Крестелев А.И., Попкова А.В.</i> МНОГОМАСШТАБНАЯ 4D МОДЕЛЬ ИНТЕГРАЦИИ ЭВОЛЮЦИИ СИСТЕМ И НЕФТИ ПО ФОРМУЛЕ А. ЭЙНШТЕЙНА -----	104
<i>Проскурина В.Е., Шилова С.В., Булидорова Г.В., Галяметдинов Ю.Г.</i> ГИБРИДНЫЕ ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ НАНОКОМПОЗИТЫ НА ОСНОВЕ ПРИРОДНЫХ И СИНТЕТИЧЕСКИХ (СО)ПОЛИМЕРОВ В ПРОЦЕССАХ ФЛОКУЛЯЦИИ SiO ₂ -----	106

<i>Рабинович А.Л., Талис А.Л.</i> СВОЙСТВА УГЛЕВОДОРОДНЫХ ЦЕПЕЙ ЛИПИДОВ ПРИРОДНЫХ МЕМБРАН И НЕКРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ СИММЕТРИЙНЫЕ ИНВАРИАНТЫ В ИХ СТРУКТУРЕ--	107
<i>Райтман О.А.</i> ИССЛЕДОВАНИЕ УЛЬТРАТОНКИХ ПОЛИМЕРНЫХ СИСТЕМ МЕТОДОМ ПОВЕРХНОСТНОГО ПЛАЗМОННОГО РЕЗОНАНСА -----	108
<i>Рогатко М.И., Хилько С.Л., Семенова Р.Г., Макарова Р.А.</i> ТЕНЗИОМЕТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЭТОКСИЛИРОВАННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ГУМИНОВЫХ КИСЛОТ НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА ЖИДКОСТЬ-ГАЗ -----	109
<i>Романова К.А., Крайнов А.А., Галяметдинов Ю.Г.</i> ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ СВОЙСТВ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК «ЯДРО/ОБОЛОЧКА» -----	110
<i>Сагдеев Д.О., Шамилов Р.Р., Воронкова В.К., Суханов А.А., Галяметдинов Ю.Г.</i> ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ПАРАМАГНИТНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК МЕТОДОМ ЭПР -----	111
<i>Сазонов О.О., Емелина О.Ю., Каюмов М.Н., Дулмаев С.Э., Давлетбаева И.М.</i> ОСОБЕННОСТИ ПОРООБРАЗОВАНИЯ ПОЛИУРЕТАНОВ НА ОСНОВЕ АМИНОЭФИРОВ БОРНОЙ КИСЛОТЫ -----	112
<i>Сафонова О.А., Шайдуллин Ф.Р., Ахметзянова Г.И., Погорельцев А.И., Матухин В.Л.</i> ФОРМИРОВАНИЕ ГЭП НА ЯДРАХ LA В СИСТЕМЕ La_2CuO_4 -----	113
<i>Сахаров Б.В., Храмов М.В., Корнюшина Т.П., Волков В.Я.</i> МЕТОД ЯМР РЕЛАКСАЦИИ В ИССЛЕДОВАНИИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ СМЕСЕЙ ТРИГЛИЦЕРИДОВ ДЛЯ ПОКРЫТИЙ ПЕРОРАЛЬНЫХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ФОРМ-----	114
<i>Северин А.В., Гопин А.В., Васильев А.Н., Власова И.Э., Пауль М.Э., Еникеев К.И.</i> НАНОТЕКСТУРИРОВАННЫЙ ГИДРОКСИАПАТИТ КАК НОСИТЕЛЬ МЕДИЦИНСКИЙ РАДИОНУКЛИДОВ: ОСОБЕННОСТИ СОРБЦИИ И ДИФФУЗИИ МИКРОКОМПОНЕНТА-	115
<i>Селиванова Н.М., Зимица М.В., Галяметдинов Ю.Г.</i> МОЛЕКУЛЯРНО-ОРГАНИЗОВАННЫЕ СРЕДЫ ДЛЯ СОЛЮБИЛИЗАЦИИ ЛЮМИНЕСЦЕНТНОГО КОМПЛЕКСА β -ДИКЕТОНАТА ЕВРОПИЯ -----	116
<i>Семенов В.А., Низамеев И.Р., Нефедьев Е.С., Кадиров М.К.</i> ВЛИЯНИЕ ПРОТОВОИОНА СОЛИ МЕТАЛЛА ПРИ ХИМИЧЕСКОМ ОСАЖДЕНИИ УПОРЯДОЧЕННЫХ НАНОПОЛОС ЖЕЛЕЗА НА ПОВЕРХНОСТЬ ГРАФИТА С ПРИМЕНЕНИЕМ МИЦЕЛЛЯРНОГО ШАБЛОНА И МАГНИТНОГО ПОЛЯ -----	117
<i>Степаненко В.Ю., Будылин Н.Ю., Чалых А.Е.</i> РАСТЕКАНИЕ КАПЕЛЬ ЭПОКСИДНЫХ ОЛИГОМЕРОВ В ПРОЦЕССЕ ИХ ОТВЕРЖДЕНИЯ -----	118
<i>Суровяткина Е.В., Степаненко В.Ю., Чалых А.Е., Ключин Е.С.</i> ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ АКРИЛОВЫХ ПОЛИМЕРОВ-----	119
<i>Тарасов А.Е., Грищук А.А., Бадамшина Э.Р.</i> ПЕРЕДАЧА ЦЕПИ НА ПОЛИМЕР ПРИ АНИОННОЙ (СО)ПОЛИМЕРИЗАЦИИ АКРИЛОНИТРИЛА -----	120
<i>Тухбатуллин А.А., Галина А.А., Гайсина А.Р., Абдрахманов А.М., Герасимов Д.Н., Шарипов Г.Л.</i> ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ИЗЛУЧАЮЩЕЙ СРЕДЫ ПРИ ТРИБОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ КРИСТАЛЛОВ СОЛЕЙ ЛАНТАНИДОВ В АТМОСФЕРЕ АЦЕТИЛЕНА -----	121
<i>Туктамьшева Р.А., Хаматгалимов А.Р., Коваленко В.И.</i> ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ИСХОДНЫХ ИЗОМЕРОВ МОЛЕКУЛЫ C_{90} -----	122
<i>Туктаров Р.Ф., Муфтахов М.В., Хатымов Р.В., Райтман О.А., Панкратьев Е.Ю.</i> ОТРИЦАТЕЛЬНЫЕ ИОНЫ ПРОИЗВОДНЫХ ПОРФИРИНА И ИХ АНАЛОГОВ -----	123

<i>Ульябаева Г.Р., Губочкина А.А., Кильдеева Н.Р.</i> ИЗУЧЕНИЕ СОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ КРИОГЕЛЕЙ ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА И ХИТОЗАНА -----	125
<i>Урюпина О.Я., Уродкова Е.К., Жаворонок Е.С., Сенчихин И.Н.</i> ГИДРОТЕРМАЛЬНЫЙ СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ ХИТОЗАНА -----	126
<i>Файзулина З.З., Джаббаров И.М., Шамсутдинова Р.А., Калдарь Ю.Р., Дулмаев С.Э., Давлетбаева И.М.</i> ИССЛЕДОВАНИЕ НАДМОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ АМФИФИЛЬНЫХ БЛОК-СОПОЛИМЕРОВ НА ОСНОВЕ 2,4-ТОЛУИЛЕНДИИЗОЦИОНАТА И МАКРОИНИЦИАТОРА С РАЗЛИЧНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ КОНЦЕВЫХ ОКСИЭТИЛЕНОВЫХ ЗВЕНЬЕВ -----	127
<i>Файков И.И., Нестерова В.П., Пулялина А.Ю.</i> ПЕРВАПОРАЦИОННЫЕ МЕМБРАНЫ ДЛЯ АБСЛЮТИЗАЦИИ СПИРТОВ -----	128
<i>Федоров Ю.И., Михайлов А.С., Ившин С.С., Гибадуллин И.З., Кравченко Э.Ф., Динисламова А.А.</i> КОМПОЗИЦИОННЫЕ ВЫСОКОНАПОЛНЕННЫЕ СОСТАВЫ С ПОЛИМЕРНОЙ ДИСПЕРСИОННОЙ СРЕДОЙ -----	129
<i>Федорова И.В., Сафонова Л.П.</i> ОСОБЕННОСТИ ВОДОРОДНОГО СВЯЗЫВАНИЯ В ПРОТОННЫХ ИОННЫХ ЖИДКОСТЯХ НА ОСНОВЕ ТРЕТИЧНОГО КАТИОНА -----	130
<i>Фельдман Э.Б.</i> ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА ДЛЯ РАЗВИТИЯ КВАНТОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ -----	131
<i>Фролов А.С., Давлитова Г.Д., Галиазметов В.Д., Погорельцев А.И., Матухин В.Л.</i> РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ В МЕДЬ-КИСЛОРОДНОЙ ПЛОСКОСТИ В СИСТЕМЕ La_2CuO_4 -----	133
<i>Хахимзянова Р.И., Валишина З.Т., Городнев И.О., Голубев А.Е., Косточко А.В.</i> СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ МОДИФИЦИРОВАННОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ ВОЛОКОН РАЗЛИЧНОЙ ПРИРОДЫ -----	134
<i>Хамидуллин О.Л., Мадиярова Г.М., Амирова Л.М.</i> МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОТВЕРЖДЕНИЯ ЭПОКСИАНИГРИДНОГО СВЯЗУЮЩЕГО С ФОСФОНИЕВЫМ КАТАЛИЗАТОРОМ В ИЗДЕЛИИ ИЗ УГЛЕПЛАСТИКА -----	135
<i>Хатымова Л.З., Лукин В.Г., Хвостенко О.Г.</i> ДИССОЦИАЦИЯ ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ИОНОВ ТЕТРАЦИАНОХИНОДИМЕТАНА (ТСNQ) НА ПОВЕРХНОСТИ КАМЕРЫ ИОНИЗАЦИИ ПРИ РЕЗОНАНСНОМ ЗАХВАТЕ МЕДЛЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ-----	136
<i>Хатымов Р.В., Шукин П.В., Муфтахов М.В.</i> МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ОБРАЗОВАНИЯ И РАСПАДА ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ИОНОВ -----	137
<i>Хилько С.Л., Котенко А.А., Гребенюк С.А., Заречная О.М., Михайлов В.А.</i> ТЕНЗИОМЕТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ ОКСИМОВ НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА ЖИДКОСТЬ-ГАЗ-----	138
<i>Целищева Л.В., Грунин Л.Ю.</i> ЯМР-РЕЛАКСАЦИЯ В ИЗУЧЕНИИ СТРУКТУРЫ ПОЛИМЕРОВ -----	139
<i>Цеплин Е.Е., Цеплина С.Н., Хвостенко О.Г.</i> МЕХАНИЗМ СПЕЦИФИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА ПОЛЯРНОГО РАСТВОРИТЕЛЯ В СПЕКТРАХ ПОГЛОЩЕНИЯ РЯДА ХИНОНОВ-----	140

<i>Цеплина С.Н., Цеплин Е.Е.</i> ЭЛЕКТРОННЫЕ ВОЗБУЖДЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ 3,5-ДИБРОМ-1-(ТИЕТАНИЛ-3)-1,2,4-ТРИАЗОЛА-----	141
<i>Чирков С.В., Кечекьян А.С., Белов Н.А., Антонов С.В., Алентьев А.Ю.</i> ВЛИЯНИЕ ОСТАТОЧНОГО РАСТВОРИТЕЛЯ И ОДНОРОДНОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ И ГАЗОТРАНСПОРТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЛЕНОК ПОЛИЭФИРИМИДОВ И ПОЛИСУЛЬФОНА-----	142
<i>Шабатин А.В., Харитонова Е.В., Сенчихин И.Н.</i> ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ СЕТЧАТЫХ МЕТАЛЛОПОЛИМЕРНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ В РАМКАХ НЕРАВНОВЕСНОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ -----	143
<i>Шабатин А.В., Харитонова Т.В.</i> ТРАНСПОРТНЫЕ ПРОЦЕССЫ НА ПОВЕРХНОСТИ МЕМБРАН ДЛЯ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМ С ПОЗИЦИЙ НЕРАВНОВЕСНОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ-----	144
<i>Шалин Н.И., Балакина М.Ю.</i> ВЛИЯНИЕ АКЦЕПТОРНОЙ ГРУППЫ НА ВЕЛИЧИНУ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЕЙ ЦИС- И ТРАНС-ИЗОМЕРНЫХ ФОРМ АЗОХРОМОФОРОВ. КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ И РАСТВОРИТЕЛЕ-----	145
<i>Шапагин А.В., Чалых А.Е.</i> СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЕ НА МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЕ В ЭПОКСИ-ТЕРМОПЛАСТИЧНЫХ СИСТЕМАХ-----	146
<i>Шевелева Н.Н., Маркелов Д.А.</i> ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ЯМР-ИССЛЕДОВАНИЕ ПОДВИЖНОСТИ В ПЕПТИДНЫХ ДЕНДРИМЕРАХ -----	147
<i>Шепелева И.И., Шокуров А.В., Коновалова Н.В., Райтман О.А., Арсланов В.В., Селектор С.Л.</i> АНОМАЛЬНЫЙ ПЕРЕНОС ЭНЕРГИИ В УЛЬТРАТОНКИХ ПЛЕНКАХ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ НАФТАЛИМИДА И ТЕТРАФЕНИЛПОРФИРИНА-----	148
<i>Шилова С.В., Басырова С.И., Третьякова А.Я., Барабанов В.П.</i> СИСТЕМА «ХИТОЗАН-ПЕКТИН-ВОДА»: КОНФОРМАЦИОННОЕ И ИОНИЗАЦИОННОЕ СОСТОЯНИЕ МАКРОМОЛЕКУЛ-----	150
<i>Шиховцева Е.С.</i> НЕЛИНЕЙНЫЕ ЭФФЕКТЫ В ФИЗИКЕ ДНК -----	151
<i>Щукин П.В., Муфтахов М.В.</i> РОЛЬ МИГРАЦИИ АТОМОВ ВОДОРОДА В РЕАКЦИЯХ ДИССОЦИАТИВНОГО ЗАХВАТА ЭЛЕКТРОНОВ МОЛЕКУЛАМИ ТИРОЗИНА-----	152
<i>Якиманский А.В., Носова Г.И., Литвинова Л.С., Березин И.А., Жукова Е.В., Смыслов Р.Ю.</i> ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА СИНТЕЗА ПОЛИФЛУОРОЕНОВ В МИКРОВОЛНОВОМ РЕАКТОРЕ МЕТОДОМ ЭЖХ-----	153
<i>Яковлева Е.О., Кадырова А.А., Вахонина Т.А., Иванова Н.В., Низамеев И.Р., Балакина М.Ю.</i> СОЗДАНИЕ ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ СОПОЛИМЕРОВ МЕТИЛМЕТАКРИЛАТА И МЕТАКРИЛАТОВ, СОДЕРЖАЩИХ РАЗЛИЧНЫЕ ХРОМОФОРНЫЕ ФРАГМЕНТЫ -----	154
<i>Ярышева А.Ю., Малахов С.Н., Стрельцов Д.Р., Ярышева Л.М., Чвалун С.Н., Вольнский А.Л.</i> СОЗДАНИЕ МИКРО- И НАНОРЕЛЬЕФА НА ПЛЕНКАХ ПОЛИПРОПИЛЕНА С АЛЮМИНИЕВЫМ ПОКРЫТИЕМ -----	155
АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ -----	156
СОДЕРЖАНИЕ-----	159

СТРУКТУРА И ДИНАМИКА МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ

Сборник тезисов докладов и сообщений

XXV Всероссийской конференции

25-29 июня 2018 года, озеро Яльчик

Компьютерная верстка: Масас Д.С.

*Макет подготовлен на основании материалов,
предоставленных авторами докладов*

Подписано в печать 04.06.2018 г. Формат 60x90/8.

Печать цифровая. Бумага офсетная. Усл. п. л. 21.

Тираж 120 экз. Заказ № 2750.

Поволжский государственный технологический университет
424000, г. Йошкар-Ола, пл. Ленина, д. 3

Отпечатано в ООО Типография «Вертикаль»
424030, г. Йошкар-Ола, ул. Мира, д. 21